PATTERN CLASSIFICATION AND SCENE ANALYSIS

Richard O. Duda
Peter E. Hart

Stanford Research Institute
Menlo Park, California

A WILEY-INTERSCIENCE PUBLICATION
JOHN WILEY & SONS
New York London Sydney Toronto 1973

Р. Дуда, П. Харт

Распознавание образов и анализ сцен

Перевод с английского
Г. Г. ВАЙНШТЕЙНА и
А. М. ВАСЬКОВСКОГО

Под редакцией
В. Л. СТЕФАНЮКА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР» МОСКВА 1976

УДК 62-506.222.001.57

Тематика книги связана с исследованиями по созданию интегральных роботов, способных к целенаправленным действиям в сложных условиях. В последние годы такие исследования интенсивно проводятся в разных странах. В книге полно и систематически изложены методы распознавания образов и дан анализ пространственных сцен по их плоскому изображению. Существующие в области распознавания образов методы авторы рассматривают с новых, нестандартных точек зрения. В конце каждой главы приводится список задач.

Книга доступна широкому кругу читателей, интересующихся или работающих над созданием искусственного интеллекта. Она может служить хорошим вводным курсом для студентов, специализирующихся в этой области.

Редакция литературы по математическим наукам

Д $\frac{20204\text{-}018}{041\ (01)\text{-}76}$ 18-76 © Перевод на русский язык, «Мир», 1976

ОТ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Предлагаемая советскому читателю книга сразу после выхода английского издания стала популярной среди тех, кто так или иначе связан с областью, для которой даже такой широкий термин, как «распознавание образов», быть может, не является исчерпывающим. Дело в том, что в связи с бурным развитием нового научного направления, посвященного исследованию «искусственного интеллекта», а в особенности с попытками построения «разумных» роботоподобных устройств, проблема образного восприятия внешнего мира стала приобретать новые оттенки.

Этот факт нашел свое отражение и в терминологии, принятой в книге, и в ее построении: книга состоит из двух более или менее самостоятельных частей — классификация образов и анализ сцен. Под классификацией образов в ней подразумевается то, что можно было бы назвать статистическим распознаванием образов. Существен здесь вероятностный характер появления тех или иных образов и такой же характер наблюдения их параметров. Подобным вопросам посвящен ряд прекрасных отечественных монографий и иных публикаций, которые авторам книги также хорошо известны.

Поскольку термин «классификация образов» не является широко принятым в нашей литературе, то мы позволили себе употребить в названии русского перевода книги более привычное «распознавание образов».

Несмотря на классичность большинства тем, затрагиваемых в первой части, она привлекает внимание благодаря удачной компоновке материала, что позволило авторам при небольшом объеме нарисовать весьма полную картину достижений и проблем, характерных для этой области. Хотелось бы указать на совсем уже практические соображения, для которых также нашлось место в этой части книги,— это обсуждение соотношения между числом признаков и объемом выборки, необходимым для надежной классификации, влияние фактора размерности и др.

Что касается второй части книги, посвященной анализу трехмерных сцен по их двумерной проекции, то она во многом представляется новой для советского читателя. Ее содержание составляют результаты интенсивного развития методов анализа плоских изображений с помощью ЭВМ, вызванных главным образом потребностями построения систем «глаз — рука» или интегральных роботов.

В этой связи полезно упомянуть, что авторы работают как раз в той лаборатории искусственного интеллекта Станфордского ис-

следовательского института в США, где и была создана наиболее впечатляющая конструкция интегрального робота — робот «Шейки», в основе деятельности которого лежит самостоятельное зрительное восприятие внешнего мира.

Данная книга уже заслужила ряд хороших отзывов, в частности ее рекомендовал своим читателям международный журнал «Artificial Intelligence», и мы думаем, что она будет хорошим дополнением к книгам по искусственному интеллекту, в течение ряда лет выпускаемым издательством «Мир».

В. Л. Стефанюк

ПРЕДИСЛОВИЕ

При написании данной книги мы ставили своей целью дать систематическое изложение важнейших разделов распознавания образов — области науки, связанной с машинным распознаванием тех или иных закономерностей при наличии шума или в сложных условиях. Стимулированное вычислительной техникой распознавание образов вступило в пору расцвета в начале 60-х годов и более десяти лет энергично развивалось. Такому росту содействовало привлечение многих других дисциплин, таких, как математическая статистика, теория связи, теория коммутационных схем, теория управления, исследование операций, биология, психология, лингвистика и вычислительные науки. Читатели, знакомые с литературой, оценят, насколько все они оживили данную область.

Такая широта создает также и значительные трудности при написании книги. Единой теории распознавания образов, включающей все главные разделы, нет, ибо каждой области применения свойственны одной ей присущие особенности, в расчете на которые и строится соответствующий подход. Наиболее развитым разделом, не связанным областью применения, является теория классификации, составляющая предмет первой части книги. Для классификации образов, представленных абстрактно в виде векторов, предлагаются формальные математические процедуры, основанные на статистической теории принятия решений.

Попытки отыскать универсальные, независимые от области приложения процедуры для построения этих векторных представлений не дали пока общих результатов. Наоборот, каждая конкретная область задач характеризуется набором процедур, соответствующих ее специфическим свойствам. Среди различных областей, представляющих интерес, наибольшее внимание до настоящего времени привлекала область изображений. Кроме того, работы по этой тематике развивались от классификации изображений к их анализу и описанию. Систематическому изложению этих вопросов в связи с анализом зрительных сцен посвящена часть II данной книги.

Так как теории и методы распознавания образов по своему характеру являются математическими дисциплинами, то необходимо остановиться на уровне математической строгости, принятом в нашем изложении материала. Откровенно говоря, он невысокий. Нас гораздо больше беспокоила возможность разобраться и понять, нежели построить строгое математическое обоснование задачи.

Это нашло отражение в множестве поясняющих примеров, правдоподобных доводах и обсуждениях поведения решений. Наравне с этим мы избегали пользоваться теорией меры и попытались обойтись без таких тонкостей, как сходимость последовательностей случайных величин, обоснование применения дельта-функций и возможность патологических случаев. Мы все же предполагаем наличие у читателя общего представления об основных разделах прикладной математики, включая теорию вероятностей и линейную алгебру; для понимания гл. 8 также окажется полезным знакомство с преобразованиями Фурье. Требуемая математическая подготовка должна соответствовать уровню аспиранта первого года обучения по специальностям вычислительная наука, электротехника и статистика.

В связи с тем что распознавание образов представляется весьма специальной областью, возможно, имеет смысл особо отметить методологическую гибкость курса по этому предмету. Многое заимствовав из различных разделов математики, а также других ранее упомянутых дисциплин, распознавание образов служит почти идеальным средством представления различных вопросов в единых рамках. Тем студентам, для которых распознавание образов как таковое не представляет самостоятельного интереса, все же целесообразно овладеть знаниями и развить мастерство, которое сослужит им хорошую службу при других обстоятельствах.

Курсы лекций для аспирантов, основанные на материале данной книги, читались нами в Калифорнийском университете в Беркли и в Станфордском университете. Каждая из двух частей этой книги может быть сравнительно неплохо изучена в течение полусеместра и достаточно глубоко — за семестр. При более сжатых сроках мы рекомендуем работать с отдельными разделами из большинства глав: одни главы прорабатывая основательно, а другие — нет. Как и всегда, интересы преподавателя должны определять окончательный выбор материала.

Мы полагали также, что эта книга окажется полезной и для специалистов-прикладников, и с этой целью попытались сделать материал более доступным. Где возможно, мы старались пользоваться общепринятыми обозначениями и включили в книгу обширный указатель. Каждую главу завершают библиографические и исторические замечания и полезный, как мы надеемся, список литературы. Хотя большие списки литературы и создают впечатление завершенности книги, на самом деле публикации появляются столь интенсивно, что полноты достичь нельзя, и мы не притязали на это.

Весьма полезным при работе над данной книгой оказалось сотрудничество с многими организациями и отдельными лицами. Прежде всего мы хотим поблагодарить Отдел информационных систем Научно-исследовательского управления военно-морских сил за финансирование по контракту № 0014-68-С-0266. Факультеты

электротехники и вычислительных наук в Беркли и Станфорде предоставили возможность проверить материал на учебной аудитории. В центре по искусственному интеллекту при Станфордском научно-исследовательском институте по инициативе руководителей д-ра Ч. А. Розена и д-ра Б. Рафаэля нам были созданы идеальные условия для работы. Хотя мы не в состоянии перечислить всех, кто помог нам своими замечаниями, особо хотелось бы поблагодарить д-ра Н. Дж. Нильсона за его многочисленные предложения по улучшению рукописи. Считаем своим долгом поблагодарить д-ра Т. О. Бинфорда, д-ра Т. М. Ковера, К. Л. Феннема, д-ра Г. Ф. Гронера, Д. Дж. Холла, д-ра М. Е. Хелмана, д-ра М. А. Касслера и д-ра Дж. Х. Мансона за их ценные замечания. Кроме того, нам хочется поблагодарить д-ра Р. К. Синглтона за его участие в работе над примерами гл. 8. И наконец, с удовольствием выражаем признательность неутомимой К. Л. Спенс за перепечатку различных вариантов рукописи.

Р. О. Дуда,
П. Е. Харт

Часть I
КЛАССИФИКАЦИЯ ОБРАЗОВ

Глава 1
ВВЕДЕНИЕ

1.1. МАШИННОЕ ВОСПРИЯТИЕ

Стремление расширить область применения цифровых вычислительных машин существует со времени их появления. В известной мере это связано с требованиями практики, с поиском наиболее эффективных способов деятельности. Отчасти это вызвано также вполне понятным стремлением к усовершенствованию конструкции или способов программирования с целью придать машинам новые, ранее недоступные им функции. Так или иначе обе эти причины имеют отношение к определенному разделу науки об искусственном интеллекте, который мы будем называть машинным восприятием.

Способность машины воспринимать окружающий мир в настоящее время крайне ограниченна. Для преобразования света, звука, температуры и т. п. в электрические сигналы созданы разнообразные датчики. Если окружающая среда контролируется достаточно четко, а сигналы по своему смыслу просты, что имеет, например, место при применении обычных устройств ввода в ЭВМ, то задача восприятия оказывается несложной. Но, как только вместо считывания перфокарт или магнитных лент от машины требуется чтение рукописного текста или расшифровка биомедицинских фотографий, вместо задач ввода данных приходится иметь дело с гораздо более сложными задачами их интерпретации.

Та видимая легкость, с которой животные и даже насекомые справляются с задачами восприятия, одновременно и ободряет, и обескураживает. Психологические и физиологические исследования дали ряд интересных результатов, касающихся процессов восприятия животными. Тем не менее этого пока недостаточно для воспроизведения процессов восприятия с помощью ЭВМ. Особую привлекательность этому вопросу придает и то обстоятельство, что восприятие есть нечто известное по опыту каждому, а вместе с тем на деле никем не понятое. Бесполезными оказываются и попытки

исследования сущности восприятия посредством самоанализа из-за того, что, по-видимому, большинство обычных процессов восприятия протекает подсознательно. Парадоксально, что все мы хорошо владеем восприятием, но никто из нас не знает о нем достаточно.

Неполнота теории восприятия не помешала человеку попытаться решить менее сложные задачи. Ряд таких задач связан с классификацией образов — отнесением материальных объектов или явлений к одному из нескольких предопределенных классов.

В результате широкого исследования вопросов классификации была получена абстрактная математическая модель, составившая теоретическую основу для разработки устройства-классификатора. Естественно, что для каждой отдельной области применения требуется в конечном счете собрать воедино специфические характеристики конкретной задачи. Наибольшее внимание среди множества таких областей привлекли задачи, относящиеся к изображениям. Цель данной книги — систематически изложить основные принципы теории классификации образов и тех методов анализа сцен, которые представляются наиболее широко применимыми и интересными.

1.2. ПРИМЕР

Чтобы пояснить характер задач, с которыми в дальнейшем придется иметь дело, рассмотрим следующий, несколько надуманный пример.

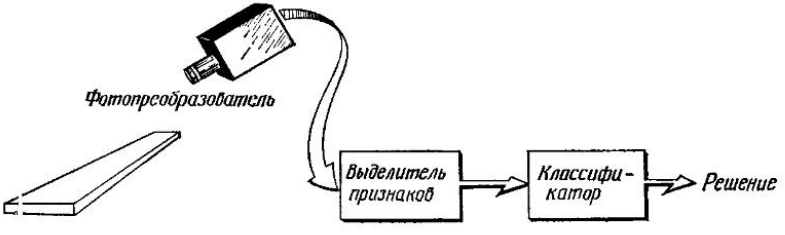


Рис. 1.1. Схема системы классификации.

Допустим, что на некоторой деревообделочной фабрике, выпускающей изделия из древесины различных сортов, требуется автоматизировать процесс сортировки обрабатываемой древесины по породе дерева. Первоначально решено попытаться разделять древесину пород березы и ясеня по ее внешнему виду. Система, предназначенная для выполнения этой задачи, может быть построена по схеме, изображенной на рис. 1.1. Полученное в камере изображение древесины передается на *выделитель признаков*, назначение которого состоит в уменьшении объема данных измерением конкретных «признаков» или «свойств», отличающих вид древесины березы и ясеня. Далее эти признаки (точнее, измеренные значения этих

признаков) подаются на *классификатор*, предназначенный для оценки представленных данных и принятия окончательного решения относительно типа древесины.

Рассмотрим, по какому принципу могут быть построены выделитель признаков и классификатор. Допустим, что на фабрике нам сообщили, что окраска березы обычно светлее, нежели ясеня. Таким образом, яркость оттенка древесины становится очевидным признаком, и можно попытаться распознавать древесину, наблюдая попросту, превышает или нет ее средняя яркость x некоторое критическое значение x_0. Для выбора величины x_0 можно взять несколько кусков древесины той и другой породы, измерить их яркость и

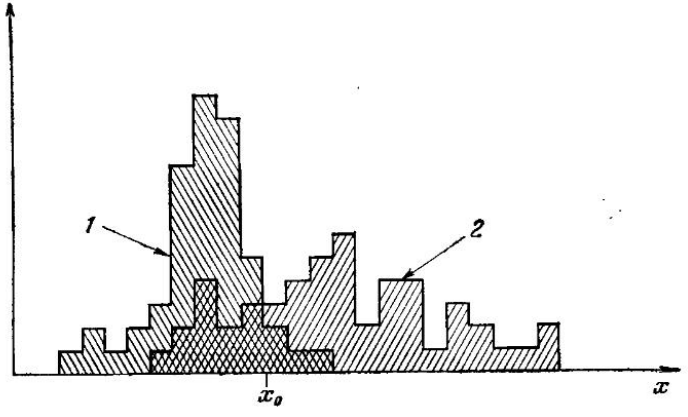


Рис. 1.2. Гистограмма яркости (по оси ординат — число кусков древесины; *1* — ясень, *2* — береза).

оценить результаты измерений. Допустим, что все это проделано и построены гистограммы, приведенные на рис. 1.2. Рассматривая гистограммы, можно установить, что береза обычно светлее ясеня, но вместе с тем очевидно, что один этот критерий не достаточно надежен. Вне зависимости от выбора x_0 отличить березу от ясеня только по яркости невозможно.

При поиске других признаков можно попытаться воспользоваться тем соображением, что волокна ясеня обычно более заметны. Хотя измерить этот признак значительно труднее, чем среднюю яркость, однако можно предположить, что заметность волокон можно оценивать по амплитуде и частоте появлений на изображении переходов от темного к светлому. Таким образом, теперь мы имеем два признака для распознавания древесины — яркость x_1 и заметность волокон x_2. Выделитель признаков сводит, таким образом, каждую из картинок к точке или *вектору признаков* x двумерного простран-

ства, где

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}.$$

Наша задача заключается теперь в разделении пространства признаков на две области, все точки одной из которых соответствуют березе, а другой — ясеню. Предположим, что мы определили значения векторов признаков для наших кусков древесины и получили разброс точек, показанный на рис. 1.3. Анализ графика приводит к следующему правилу распознавания полученных данных: считать, что данная древесина есть ясень, если вектор признаков попадает выше прямой AB; в противном случае считать, что это береза.

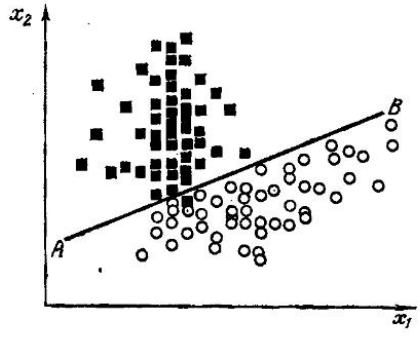


Рис. 1.3. Диаграмма разброса векторов признаков (■ — ясень, ○ — береза).

Несмотря на то что разделение взятых кусков посредством данного правила достаточно хорошее, нет никакой гарантии, что так же хорошо оно будет и по отношению к новым кускам. Безусловно, разумнее было бы взять еще несколько кусков и посмотреть, какая часть из них будет определена правильно. Таким образом, мы приходим к заключению, что поставленная задача включает в себя и элементы статистики, в связи с чем может потребоваться поиск такой процедуры классификации, которая сделает вероятность ошибки минимальной.

Говоря об этом, следует помнить, что в качестве примера была выбрана простая задача. Значительно реальнее задача сортировки древесины на много различных классов. В частности, чтобы отличить дуб от березы и ясеня, вполне могут потребоваться и такие менее очевидные признаки, как «ровность волокон». При большем числе классов и признаков, возможно, придется отказываться от графического способа представления классификатора. Поэтому для дальнейшего изложения вопроса потребуется развить теоретические основы метода.

1.3. МОДЕЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ

Рассмотренный пример содержит многие элементы наиболее распространенной абстрактной модели распознавания образов — модели классификации. Модель эта состоит из трех частей — датчика, выделителя признаков и классификатора. Датчик воспринимает воздействие и преобразует его к виду, удобному для машинной обработки. Выделитель признаков (называемый также рецептором,

фильтром свойств, детектором признаков или препроцессором) выделяет из входных данных предположительно относящуюся к делу информацию. Классификатор на основе этой информации относит эти данные к одной из нескольких категорий.

Обсуждение принципа действия или конструкции датчика не входит в задачи данной книги. Выделение признаков и классификация, напротив, представляет для нас интерес. С точки зрения теории провести черту между этими двумя действиями можно весьма условно. Идеальный выделитель признаков предельно упрощает работу классификатора, тогда как при наличии всемогущего классификатора не требуется помощь выделителя признаков. Различие это хотя и весьма важно, но делается оно, исходя скорее из практических, нежели теоретических соображений.

Вообще говоря, задача выделения признаков более специализирована по сравнению с задачей классификации. Хороший выделитель признаков, предназначенный для сортировки древесины, принесет, по-видимому, малую пользу при сравнении отпечатков пальцев или классификации клеток крови. Однако большое число технических приемов было развито в связи с задачей извлечения полезной информации из изображения. Часть II данной книги как раз посвящена описанию этих методов и их свойств.

Задача классификации по существу представляет собой задачу разбиения пространства признаков на области, по одной для каждого класса. Разбиение это в принципе надо производить так, чтобы не было ошибочных решений. Если этого сделать нельзя, то желательно уменьшить вероятность ошибки, или если ошибки имеют различную цену, то сделать минимальной среднюю цену ошибки. При этом задача классификации превращается в задачу статистической теории принятия решений, широко применяемую в различных областях теории распознавания образов. Этому и ряду других вопросов, относящихся к теории классификации, посвящена часть I данной книги.

1.4. ОПИСАТЕЛЬНЫЙ ПОДХОД

В области распознавания образов и машинного восприятия существует много задач, для которых модели классификации совершенно не пригодны. Например, при анализе фотографии следов частиц в пузырьковой камере требуется не просто классификация, а описание картины. Такое описание должно содержать информацию как об отдельных частях картины, так и о связи между ними. В принципе оно должно непосредственно отражать структуру, присущую исходной сцене.

Рассмотрим, например, простую сцену, показанную на рис. 1.4. Возможно, что для некоторых целей окажется вполне удовлетворительным простейшее описание вроде «на письменном столе» или

«стоит телефон». Более полный анализ должен включать перечень всех основных имеющихся объектов — телефона, бумаги, чашки, карандашей, ластика и т. д. При еще более полном анализе будут выявлены отношения между этими объектами, что может вылиться в выражение «(Два карандаша на пачке бумаги) перед (чашка слева от (ластик перед телефоном))».

Задача анализа видимой сцены и получения ее структурного описания оказывается очень трудной. Приемлемая для всех форма-

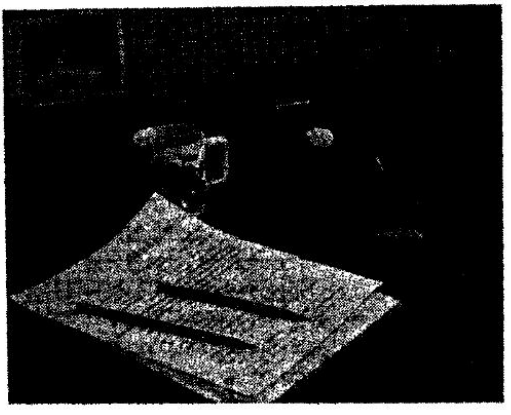


Рис. 1.4. Простая сцена.

лизация этой проблемы, аналогичная модели классификации, едва лишь выявляется из работ, выполненных к настоящему моменту. Были предприняты попытки заимствовать понятия из теории формальных языков и построить лингвистическую модель для анализа сцен. При этом сцена рассматривается как выражение на языке, грамматика которого определяется допустимыми структурными отношениями. Исходя из этой формулировки, анализ сцен можно рассматривать как процесс грамматического разбора, в результате которого описание всей сцены получается в виде композиции взаимосвязанных подсцен.

Методы использования структурных отношений между элементами картины с целью ее анализа и создания полезного описания не исчерпываются лингвистической моделью. Хотя общей идейной основы, объединяющей все эти методы, еще не создано, тем не менее был разработан ряд интересных процедур для конкретных задач, которые носят эвристический характер. Эти процедуры сами по себе можно подвергнуть рассмотрению, и изучением этого общего вопроса описательного подхода к анализу сцен заканчивается часть II.

1.5. ОБЗОР СОДЕРЖАНИЯ КНИГИ ПО ГЛАВАМ

Часть I данной книги в основном посвящена вопросам статистики. В гл. 2 ставится задача классификации в терминах теории принятия решений и обосновывается общая структура оптимального классификатора. Задача эта решается, исходя из предположения, что все относящиеся к ней распределения вероятностей известны. Остальные главы части I связаны со способами представления, когда вероятностная структура задачи не известна.

В гл. 3 предполагается, что известно все, что относится к задаче, за исключением некоторых параметров распределения. Описываются процедуры оценки параметров, исходя из требования максимального правдоподобия и с использованием байесовского подхода для оценки. В случае когда ни один из обычных способов оценки параметров не подходит, можно прибегнуть к непараметрическим методам. При использовании таких процедур, рассматриваемых в гл. 4, вместо знания вида распределения потребуется большое число выборок.

В гл. 5 производится параметризация классификатора и рассматриваются различные методы прямого определения классификатора непосредственно по измеряемым значениям признаков. Эти методы, идущие от линейного дискриминанта Фишера, включают общеизвестный персептрон и процедуры сглаживания, оценки среднеквадратичной ошибки, стохастическую аппроксимацию, потенциальные функции и линейное программирование. Часть I завершается гл. 6, в которой рассматриваются различные приемы обучения и группирования без учителя.

Часть II открывается гл. 7, где рассматриваются процедуры представления изображений и выполнения таких основных операций, как повышение резкости, сглаживание, сравнение с эталоном и разбиение на однородные области. В гл. 8 развивается понятие пространственной фильтрации и дается интерпретация некоторых из этих операций в частотной области. Большое число методов описания линий и форм на изображении является предметом гл. 9. Здесь описываются топологические, линейные и метрические свойства формы, а также ряд методов описания, основанных на этих свойствах.

В гл. 10 и 11 содержатся важные математические сведения, относящиеся к изображениям трехмерных объектов. В гл. 10 выводятся уравнения перспективного преобразования и показывается, как их можно с пользой применить к анализу сцен. В гл. 11 исследуется вопрос о проективных инвариантах, т. е. о величинах, остающихся неизменными на различных изображениях одного и того же объекта. Наконец, в гл. 12 обсуждаются некоторые из наиболее важных современных подходов к сложной задаче полного анализа зрительных сцен.

1.6. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Число публикаций, относящихся к распознаванию образов и анализу сцен, выросло настолько, что даже по специальным вопросам изданы сотни работ. Списки литературы в конце каждой главы позволят читателю ознакомиться с историей вопроса и получить исходные сведения, чтобы в дальнейшем перейти к углубленному изучению. Дополнительные сведения читатель может получить и из других работ и ряда полезных обзорных статей.

В качестве краткого обзора работ из области распознавания образов как одного из разделов науки об искусственном интеллекте можно рекомендовать важную статью Минского (1961). Интересен также обзор работ, относящихся к моделям классификации, проведенный Надем (1968). В книге Нильсона (1965) хорошо объяснены основные принципы классификации. Ясный и наиболее современный обзор опубликован Хо и Агреулой (1968). Исчерпывающий обзор методов, применяемых для извлечения признаков из изображений, опубликован Левайном (1969). Общие принципы автоматического преобразования изображения описаны Хокинсом (1970) и систематически изложены в научном труде Розенфельда (1969).

Имеется множество интересных направлений, относящихся к изложенным в данной книге вопросам, но не вошедших в нее. Читателям, интересующимся выделением образов и кодированием изображений, можно было бы рекомендовать обзор Хуанга, Шрайбера и Третьяка (1971). Обзоры Колерса (1968) и Гоуса (1969) будут особенно полезны для тех, кто увлекается интереснейшей областью восприятия человека и животных. Те, кого интересует философская сторона вопроса, найдут весьма ценными книги Ватанабе (1969) и Бонгарда (1967). И наконец, читатели, интересующиеся практическим применением положений теории, найдут большое количество библиографических ссылок в литературном обзоре Стивенса (1970).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Бонгард М.
Проблема узнавания, М., «Наука», 1967.

Ватанабе (Watanabe M. S.)
Knowing and Guessing (John Wiley, New York, 1969).

Гоус (Gose E. E.)
Introduction to biological and mechanical pattern recognition, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 203—252, S. Watanabe, ed. (Academic Press, New York, 1969).

Колерс (Kolers P. A.)
Some psychological aspects of pattern recognition, in Recognizing Patterns, pp. 4—61, P. A. Kolers and M. Eden, eds. (MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1968).

Левайн (Levine M. D.)
Feature extraction: a survey, *Proc. IEEE*, **57**, 1391—1407 (August 1969).
Минский (Minsky M.)
Steps toward artificial intelligence, *Proc. IRE*, **49**, 8—30 (January 1961); also in Computers and Thought, pp. 406—450, E. A. Feigenbaum and J. Feldman, eds. (McGraw-Hill, New York, 1963).
Нильсон (Nilsson N. J.)
Learning Machines (McGraw-Hill, New York, 1965). [Русский перевод: Обучающиеся машины, М., «Мир», 1967.]
Надь (Nagy G.)
State of the art in pattern recognition, *Proc. IEEE*, **56**, 836—862 (May 1968).
Розенфельд (Rosenfeld A.)
Picture Processing by Computer (Academic Press, New York, 1969). [Русский перевод: Распознавание и обработка изображений, М., «Мир», 1972.]
Стивенс (Stevens M. E.)
Research and development in the computer and information sciences. Vol. 1. Information acquisition, sensing, and input — a selective literature review, National Bureau of Standards Monograph 113, Vol. 1 (March 1970).
Хокинс (Hawkins J. K.)
Image processing principles and techniques, in Advances in Information Systems, Vol. 3 pp. 113—214, J. T. Tou, ed. (Plenum Press, New York and London, 1970).
Хо и Агреула (Ho Y. C., Agrawala A.)
On pattern classification algorithms: introduction and survey, *Proc. IEEE*, **56**, 2101—2114 (December 1968).
Хуанг, Шрайбер и Третьяк (Huang T. S., Schreiber W. F., Tretiak O. J.)
Image Processing, *Proc. IEEE*, **59**, 1586—1609 (November 1971).

Глава 2

БАЙЕСОВСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕНИЙ

2.1. ВВЕДЕНИЕ

Байесовская теория принятия решений составляет основу статистического подхода к задаче классификации образов. Этот подход основан на предположении, что задача выбора решения сформулирована в терминах теории вероятностей и известны все представляющие интерес вероятностные величины. В данной главе изложены основные положения этой теории и показано, что ее можно рассматривать просто как формализацию общепринятых приемов. В последующих главах рассматриваются задачи, возникающие в случаях, когда вероятностная структура известна не полностью.

Прежде чем дать в разд. 2.2 общее строгое изложение байесовской теории решений, остановимся на конкретном примере. Вернемся к рассмотренной в гл. 1 задаче построения классификатора, различающего два вида древесины — ясень и березу. Предположим, что наблюдателю, следящему за выпуском древесины с завода, представляется настолько трудным предсказать, какого вида древесина появится следующей, что последовательность ее видов кажется ему случайной. Используя терминологию теории решений, можно сказать, что появление куска древесины того или иного вида означает, что природа пришла в одно из двух состояний — древесина оказывается либо ясенем, либо березой. Обозначим *состояния природы* символом ω, причем для ясеня $\omega=\omega_1$, а для березы $\omega=\omega_2$. Состояние ω может рассматриваться как случайная величина в том смысле, что состояние природы не предсказуемо.

Если фабрика выпускает ясеня столько же, сколько березы, то можно сказать, что следующий кусок в равной мере может оказаться или ясенем, или березой. В общем случае предположим, что существует некоторая *априорная вероятность* $P(\omega_1)$ того, что следующий кусок окажется ясенем, и $P(\omega_2)$ — что это будет береза. Эти априорные вероятности отражают исходное знание того, с какой степенью уверенности можно предсказать ясень или березу до их действительного появления. Предполагается, что величины $P(\omega_1)$ и $P(\omega_2)$ неотрицательны и сумма их равна единице [1]).

[1]) При обозначениях обычно используется прописная P для функции распределения и строчная p для функции плотности распределения вероятностей. Функция плотности распределения вероятностей неотрицательна, и интеграл от нее равен единице.

Допустим сначала, что требуется решить, какой из видов древесины появится следующим, не видя ее. Единственная информация, которой мы располагаем, это величины априорных вероятностей. Если решение необходимо принять, исходя из столь малой информации, то разумно воспользоваться следующим *решающим правилом*: принять решение ω_1, если $P(\omega_1) > P(\omega_2)$, и ω_2 в противном случае.

Эта процедура может показаться странной в том смысле, что в любом случае принимается одно и то же решение, хотя и известно о возможности появления обоих видов древесины. Насколько она

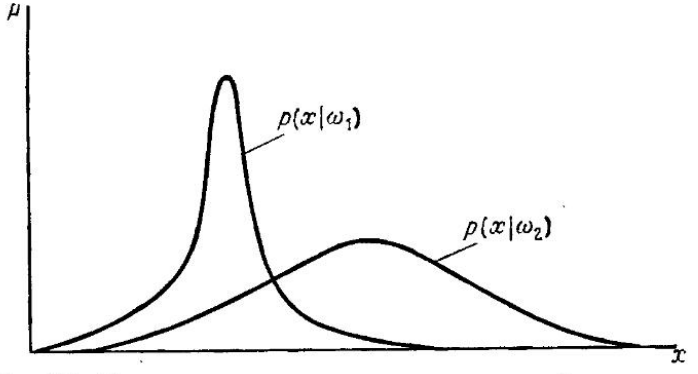


Рис. 2.1. Пример плотности распределения, условной по классу.

хороша, зависит от величины априорных вероятностей. Если $P(\omega_1)$ намного больше, чем $P(\omega_2)$, то наше решение отдавать предпочтение ω_1 должно большей частью оправдываться. Если $P(\omega_1) = P(\omega_2)$, то у нас 50 шансов из 100 быть правыми. Вообще вероятность ошибки равна в данном случае меньшей из величин $P(\omega_1)$ и $P(\omega_2)$, а из дальнейшего станет видно, что при таких условиях никакое другое правило решения не даст меньшей вероятности ошибки.

В большинстве случаев при выборе решения не ограничиваются столь малой информацией. В нашем примере в качестве определяющего признака можно взять яркость x оттенка древесины. Разные куски древесины выглядят светлее или темнее, так что естественно выразить это различие с помощью вероятностных законов, а x рассматривать как непрерывную случайную величину, распределение которой зависит от состояния природы. Пусть $p(x|\omega_j)$ — *условная плотность распределения* величины x в состоянии ω_j, т. е. функция плотности распределения случайной величины x при условии, что состояние природы есть ω_j. В этом случае различие между $p(x|\omega_1)$ и $p(x|\omega_2)$ отражает различие яркости оттенков ясеня и березы (рис. 2.1).

Допустим, что известны как априорные вероятности $P(\omega_j)$, так и условные плотности $p(x|\omega_j)$. Предположим далее, что мы измеряем яркость оттенка древесины и находим, что это есть x. Ответ на вопрос, в какой мере это измерение повлияет на наше представление об истинном состоянии природы, дает *правило Байеса*:

$$P(\omega_j \mid x) = \frac{p(x \mid \omega_j)\, P(\omega_j)}{p(x)}, \tag{1}$$

где

$$p(x) = \sum_{j=1}^{2} p(x \mid \omega_j)\, P(\omega_j). \tag{2}$$

Правило Байеса показывает, как наличие измеренной величины x позволяет из априорной вероятности $P(\omega_j)$ получить *апостериорную*

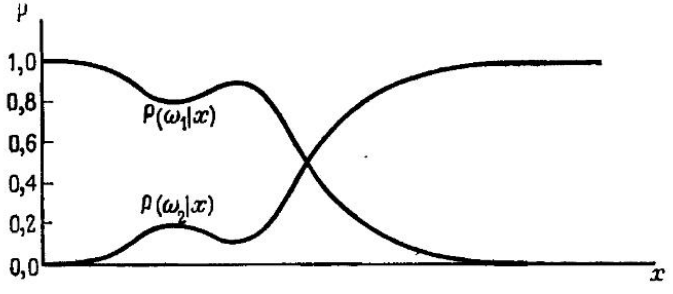


Рис. 2.2. Апостериорные вероятности для $P(\omega_1)=2/3$, $P(\omega_2)=1/3$.

вероятность $P(\omega_j|x)$. Зависимость $P(\omega_j|x)$ от x для случая $P(\omega_1)=2/3$ и $P(\omega_2)=1/3$ показана на рис. 2.2. Если при наблюдении получено значение x, для которого $P(\omega_1|x)$ больше, чем $P(\omega_2|x)$, то естественно склониться к решению, что истинное состояние природы есть ω_1. Аналогично, если $P(\omega_2|x)$ больше, чем $P(\omega_1|x)$, то естественно склониться к выбору ω_2. Чтобы обосновать это, вычислим вероятность ошибки при принятии решения, когда наблюдалось определенное значение x:

$$P(\text{ошибка} \mid x) = \begin{cases} P(\omega_1 \mid x), & \text{если принимается решение } \omega_2, \\ P(\omega_2 \mid x), & \text{если принимается решение } \omega_1. \end{cases}$$

Очевидно, что в каждом из случаев, когда наблюдается одно и то же значение x, вероятность ошибки можно свести к минимуму, принимая решение ω_1, если $P(\omega_1|x) > P(\omega_2|x)$, и ω_2, если $P(\omega_2|x) > P(\omega_1|x)$. Разумеется, мы не можем дважды наблюдать точно то же самое значение величины x. Будет ли это правило минимизировать среднюю вероятность ошибки? Да, поскольку средняя веро-

ятность ошибки определяется выражением

$$P\ (\text{ошибка}) = \int_{-\infty}^{\infty} P\ (\text{ошибка},\ x)\, dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} P\ (\text{ошибка}\,|\,x)\, p\,(x)\, dx,$$

и если для каждого x вероятность $P(\text{ошибка}|x)$ достигает наименьшего значения, то и интеграл должен быть минимальным. Этим мы обосновали следующее *байесовское решающее правило*, обеспечивающее наименьшую вероятность ошибки:

$$\text{Принять решение}\quad \begin{array}{l} \omega_1, \text{ если } P(\omega_1\,|\,x) > P(\omega_2\,|\,x); \\ \omega_2 \text{ в противном случае.} \end{array}$$

Самим видом решающего правила подчеркивается роль апостериорных вероятностей. Используя уравнение (1), можно выразить это правило через условные и априорные вероятности. Заметим, что $p(x)$ в уравнении (1) с точки зрения принятия решения роли не играет, являясь всего-навсего масштабным множителем, обеспечивающим равенство $P(\omega_1|x)+P(\omega_2|x)=1$. Исключив его, получим следующее решающее правило, полностью эквивалентное прежнему:

$$\text{Принять решение}\quad \begin{array}{l} \omega_1, \text{ если } p(x\,|\,\omega_1)\, P(\omega_1) > p(x\,|\,\omega_2)\, P(\omega_2); \\ \omega_2 \text{ в противном случае.} \end{array}$$

Чтобы пояснить существо вопроса, рассмотрим крайние случаи. Пусть для некоторого x получено, что $p(x|\omega_1)=p(x|\omega_2)$, так что конкретное наблюдение не дает информации о состоянии природы. В этом случае решение, которое мы примем, целиком зависит от априорных вероятностей. С другой стороны, если $P(\omega_1)=P(\omega_2)$, то состояния природы априорно равновозможны, и вопрос о принятии решения опирается исключительно на $p(x|\omega_j)$ — *правдоподобие* ω_j при данном x. В общем случае при выборе решения важны обе указанные величины, что и учитывается правилом Байеса, обеспечивающим наименьшую вероятность ошибки.

2.2. БАЙЕСОВСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕНИЙ — НЕПРЕРЫВНЫЙ СЛУЧАЙ

Дадим более строгую формулировку ранее рассмотренных соображений, сделав четыре следующих обобщения:

1) Допускается использование более одного признака.
2) Допускаются более двух состояний природы.
3) Допускаются действия, отличные от решения о состоянии природы.

4) Вводится понятие функции потерь, более общее, нежели вероятность ошибки.

Сами обобщения и связанные с ними усложнения формул не должны затенять того обстоятельства, что в основном речь идет о явлениях, по существу таких же, как в рассмотренном простом примере. Так, использование большего числа признаков приводит всего-навсего к замене скалярной величины *x вектором признаков* $\mathbf{x}$. Рассмотрение более чем двух состояний природы позволяет провести полезные обобщения при незначительном усложнении выражений. Применение действий, отличных от классификации, прежде всего означает возможность отбрасывания, т. е. отказа от принятия решения в неопределенных ситуациях, что целесообразно, если непринятие решения не обходится слишком дорого. Применение функции потерь позволяет точно установить цену каждого действия. Теоретически это также дает возможность рассматривать ситуации, при которых некоторые виды ошибок имеют большую цену в сравнении с другими, хотя большинство изящных аналитических результатов достигается в предположении, что все ошибки равноценны. Отнеся сказанное к вступлению, перейдем к формальному изложению теории.

Пусть $\Omega = \{\omega_1, \ldots, \omega_s\}$ есть конечное множество из s состояний природы и $A = \{\alpha_1, \ldots, \alpha_a\}$ есть конечное множество из a возможных действий. Пусть $\lambda(\alpha_i|\omega_j)$ — потери, связанные с принятием действия α_i, когда состояние природы есть ω_j. Пусть вектор признаков $\mathbf{x}$ есть d-компонентная векторная случайная величина, и пусть $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ является функцией условной по состоянию природы плотности распределения случайной величины $\mathbf{x}$, т. е. функцией плотности $\mathbf{x}$ при условии, что состояние природы — ω_j. Наконец, пусть $P(\omega_j)$ априорная вероятность того, что состояние природы есть ω_j. Тогда апостериорная вероятность $P(\omega_j|\mathbf{x})$ может быть вычислена из $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ посредством байесовского правила:

$$P(\omega_j|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_j)\,P(\omega_j)}{p(\mathbf{x})}, \tag{3}$$

где

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{s} p(\mathbf{x}|\omega_j)\,P(\omega_j). \tag{4}$$

Предположим, что мы наблюдаем определенное значение $\mathbf{x}$ и собираемся произвести действие α_i. Если текущее состояние природы есть ω_j, то мы понесем потери $\lambda(\alpha_i|\omega_j)$. Так как $P(\omega_j|\mathbf{x})$ есть вероятность того, что действительное состояние природы — ω_j, то ожидаемые потери, связанные с совершением действия α_i, равны

просто

$$R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{s} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x}). \tag{5}$$

Согласно терминологии теории решений, ожидаемые потери называются *риском*, а $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ — *условным риском*. Всякий раз при наблюдении конкретного значения $\mathbf{x}$ ожидаемые потери можно свести к минимуму выбором действия, минимизирующего условный риск. Покажем теперь, что это и есть оптимальная байесовская решающая процедура.

Выражаясь формально, задача состоит в том, чтобы по $P(\omega_j)$ найти байесовское решающее правило, которое бы свело к минимуму общий риск. *Решающее правило* есть функция $\alpha(\mathbf{x})$, которая подсказывает, какое действие следует предпринять при любом из возможных результатов наблюдений [1]). Более точно, для любого $\mathbf{x}$ *решающая функция* принимает одно из a значений $\alpha_1, \ldots, \alpha_a$. Общий риск R — это ожидаемые потери, связанные с данным правилом принятия решений. Так как $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ есть условный риск, связанный с действием α_i, а это действие определяется решающим правилом, то общий риск выражается формулой

$$R = \int R(\alpha(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}, \tag{6}$$

где символом $d\mathbf{x}$ мы обозначаем бесконечно малое приращение объема, а интеграл берется по всей области существования признака. Ясно, что если $\alpha(\mathbf{x})$ выбрано таким образом, что величина $R(\alpha(\mathbf{x})|\mathbf{x})$ имеет наименьшее значение для каждого $\mathbf{x}$, то и общий риск будет минимальным. Этим объясняется следующая формулировка *байесовского решающего правила*: для минимизации общего риска требуется вычислить условный риск согласно выражению

$$R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{s} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x}) \tag{5}$$

для $i=1, \ldots, a$ и выбрать действие α_i, при котором $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ минимален. (Заметим, что если минимум $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ достигается более чем для одного действия, то не имеет значения, какое из этих действий принято; здесь пригодно любое правило, снимающее неопределенность.) Получающийся минимальный общий риск называется *байесовским риском*, соответствующим наилучшему возможному образу действия.

---

[1]) Читателю, знакомому с теорией игр, оно известно как детерминированное решающее правило. В теории игр на месте природы выступает злонамеренный противник, который может извлечь пользу из детерминированной стратегии, так что часто оказывается выгодным рандомизированное решающее правило. Однако в нашем случае рандомизированное правило преимуществ не дает. С математической иллюстрацией этого читатель встретится в задаче 8.

2.3. КЛАССИФИКАЦИЯ В СЛУЧАЕ ДВУХ КЛАССОВ

Применим полученные результаты к исследованию задач классификации в случае двух классов. В этом случае действие α_1 соответствует принятию решения, что истинное состояние природы есть ω_1, а действие α_2 — что истинное состояние есть ω_2. Для простоты записи пусть $\lambda_{ij}=\lambda(\alpha_i|\omega_j)$ — потери вследствие принятия решения ω_i при истинном состоянии природы ω_j. Тогда в соответствии с уравнением (5) условный риск запишется в виде

$$R(\alpha_1|\mathbf{x})=\lambda_{11}P(\omega_1|\mathbf{x})+\lambda_{12}P(\omega_2|\mathbf{x}),$$
$$R(\alpha_2|\mathbf{x})=\lambda_{21}P(\omega_1|\mathbf{x})+\lambda_{22}P(\omega_2|\mathbf{x}).$$

Существует ряд способов записи решающего правила с минимальным риском, каждый со своими небольшими преимуществами. Основное же правило заключается в выборе ω_1, если $R(\alpha_1|\mathbf{x})<R(\alpha_2|\mathbf{x})$. На языке апостериорных вероятностей это правило состоит в выборе ω_1, если

$$(\lambda_{21}-\lambda_{11})P(\omega_1|\mathbf{x})>(\lambda_{12}-\lambda_{22})P(\omega_2|\mathbf{x}).$$

Обычно потери в случае ошибки больше, чем при правильном принятии решения, так что оба коэффициента $\lambda_{21}-\lambda_{11}$ и $\lambda_{12}-\lambda_{22}$ положительны. Таким образом, наше решение главным образом определяется более правдоподобным состоянием природы, хотя и требуется масштабирование апостериорных вероятностей соответствующими разностями потерь. Пользуясь правилом Байеса, можно заменить апостериорные вероятности априорными и условными плотностями, в результате чего получим эквивалентное правило: принять решение ω_1, если

$$(\lambda_{21}-\lambda_{11})p(\mathbf{x}|\omega_1)P(\omega_1)>(\lambda_{12}-\lambda_{22})p(\mathbf{x}|\omega_2)P(\omega_2).$$

Из вполне логичного предположения, что $\lambda_{21}>\lambda_{11}$, непосредственно вытекает другое правило: принять решение ω_1, если

$$\frac{p(\mathbf{x}|\omega_1)}{p(\mathbf{x}|\omega_2)}>\frac{\lambda_{12}-\lambda_{22}}{\lambda_{21}-\lambda_{11}}\cdot\frac{P(\omega_2)}{P(\omega_1)}.$$

Такая запись решающего правила подчеркивает зависимость плотностей распределений от $\mathbf{x}$. Величина $p(\mathbf{x}|\omega_j)$, рассматриваемая как функция от ω_j, называется *правдоподобием* ω_j при данном $\mathbf{x}$, а $p(\mathbf{x}|\omega_1)/p(\mathbf{x}|\omega_2)$ — *отношением правдоподобия*. Таким образом, байесовское решающее правило можно сформулировать как рекомендацию выбирать решение ω_1 в случае, если отношение правдоподобия превышает пороговое значение, не зависящее от наблюдаемого $\mathbf{x}$.

2.4. КЛАССИФИКАЦИЯ С МИНИМАЛЬНЫМ УРОВНЕМ ОШИБКИ

Обычно в задачах классификации каждое состояние природы связывается с одним из c различных классов, а действие α_i интерпретируется как принятие решения, что истинное состояние природы есть ω_i [1]). Если выбрано действие α_i, а истинное состояние природы есть ω_j, то решение верно в случае, если $i=j$, и ошибочно при $i\neq j$. Если ошибки нежелательны, то естественно было бы обратиться к поиску такого решающего правила, при котором достигается наименьшая средняя вероятность ошибки, или наименьший *уровень ошибок*.

В качестве функции потерь для такого случая особый интерес представляет так называемая *симметричная*, или *нуль-единичная*, функция потерь

$$\lambda(\alpha_i \mid \omega_j) = \begin{cases} 0, & i=j \\ 1, & i\neq j, \end{cases} \qquad i,\ j=1,\ \ldots,\ c. \tag{7}$$

Эта функция связывает отсутствие потерь с правильным решением и приписывает единичные потери любым ошибкам. Все ошибки, таким образом, имеют одинаковую цену. Риск, соответствующий такой функции потерь, и есть в точности средняя вероятность ошибки, так как условный риск выражается формулой

$$\begin{aligned} R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^{c} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j)\, P(\omega_j \mid \mathbf{x}) = \\ &= \sum_{j\neq i} P(\omega_j \mid \mathbf{x}) = 1 - P(\omega_i \mid \mathbf{x}), \end{aligned} \tag{8}$$

а $P(\omega_i|\mathbf{x})$ есть условная вероятность того, что действие α_i верно. Байесовское решающее правило, минимизирующее риск, рекомендует применять то действие, при котором условный риск минимален. Таким образом, чтобы получить наименьшую среднюю вероятность ошибки, мы должны выбрать такое i, для которого апостериорная вероятность $P(\omega_i|\mathbf{x})$ *максимальна*. Иными словами, для *минимизации уровня ошибок* следует руководствоваться таким правилом:

принять решение ω_i,
если $P(\omega_i \mid \mathbf{x}) > P(\omega_j \mid \mathbf{x})$ для всех $j\neq i$.

---

[1]) В данном случае $a=s=c$ есть число классов. Иногда бывает полезно определить действие α_{c+1} как отказ от принятия решения; этот случай рассматривается в задачах 6 и 7.

2.5. КЛАССИФИКАТОРЫ, РАЗДЕЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ И ПОВЕРХНОСТИ РЕШЕНИЙ

2.5.1. СЛУЧАЙ МНОГИХ КЛАССОВ

Допустимы различные способы описания классификаторов. Один из способов, дающий нечто вроде канонической формы классификатора, состоит в представлении его посредством системы *разделяющих функций* $g_i(\mathbf{x})$, $i=1, \ldots, c$. Говорят, что классификатор

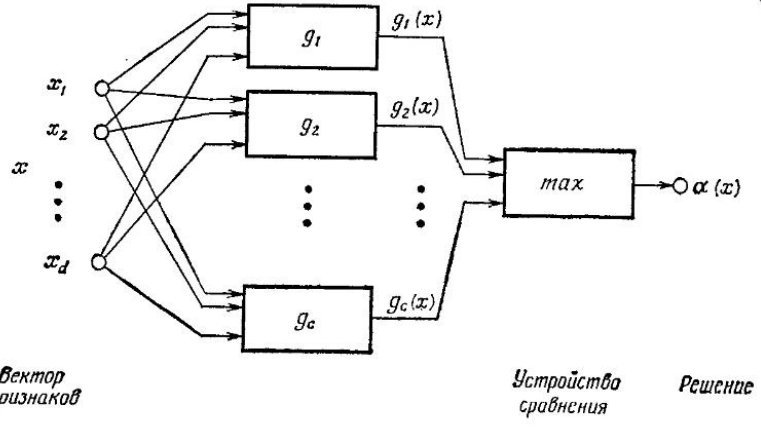


Рис. 2.3. Схема классификатора образов.

ставит в соответствие вектор признаков $\mathbf{x}$ классу ω_i, если справедливо неравенство

$$g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x}) \text{ для всех } j \neq i. \tag{9}$$

Классификатор, таким образом, рассматривается как устройство, вычисляющее c разделяющих функций и выбирающее решение, соответствующее наибольшей из них. Такое представление классификатора изображено в виде блок-схемы на рис. 2.3.

Это естественный и простой способ представления байесовского классификатора. В общем случае положим $g_i(\mathbf{x}) = -R(\alpha_i|\mathbf{x})$, так как наибольшая из разделяющих функций будет тогда соответствовать наименьшему условному риску. В случае классификации с минимальным уровнем ошибки задачу можно еще упростить, принимая $g_i(\mathbf{x}) = P(\omega_i|\mathbf{x})$, так что наибольшая по величине разделяющая функция будет соответствовать наибольшей апостериорной вероятности.

Ясно, что выбор разделяющих функций не единствен. Всегда можно, не влияя на решение, умножить разделяющие функции на положительную константу или прибавить к ним какую-либо константу. Более того, если заменить каждую из $g_i(\mathbf{x})$ на $f(g_i(\mathbf{x}))$,

где f — монотонно возрастающая функция, то результирующая классификация не изменится. Это обстоятельство может привести к существенным аналитическим и расчетным упрощениям. В частности, при классификации с минимальным уровнем ошибки любой из следующих вариантов приводит к одинаковым результатам,

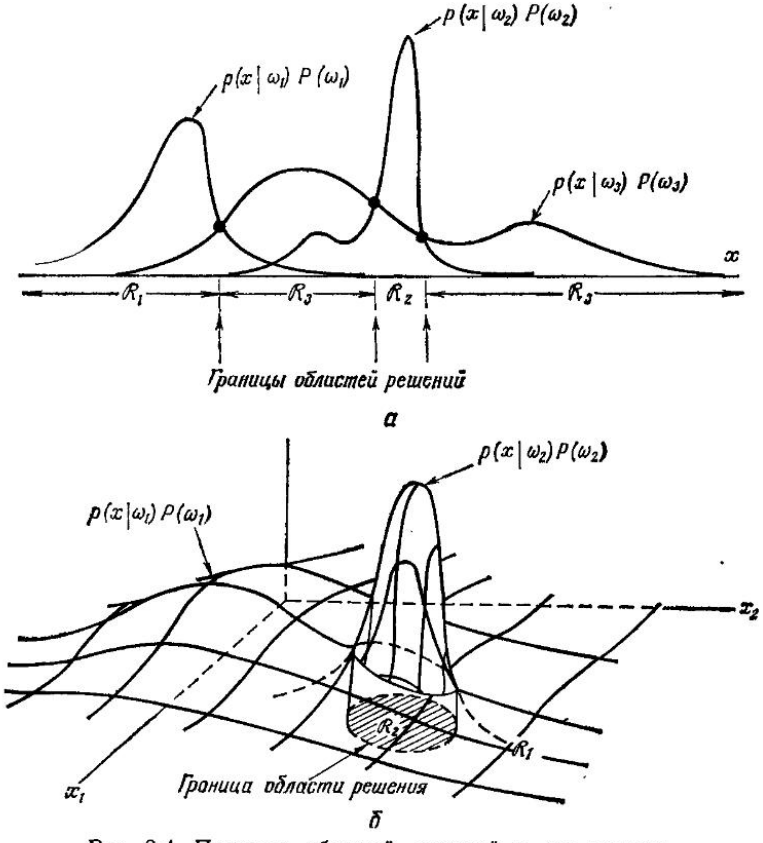


Рис. 2.4. Примеры областей решений и их границ.

хотя некоторые и могут оказаться намного проще других с точки зрения понятности или удобства вычислений:

$$g_i(\mathbf{x}) = P(\omega_i \mid \mathbf{x}), \tag{10}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_i) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x} \mid \omega_j) P(\omega_j)}, \tag{11}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x} \mid \omega_i) P(\omega_i), \tag{12}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \log p(\mathbf{x} \mid \omega_i) + \log P(\omega_i). \tag{13}$$

Решающие правила остаются эквивалентными независимо от разнообразия этих форм записи разделяющих функций. Действие любого из решающих правил состоит в том, чтобы разбить пространство признаков на *с областей решений* $\mathcal{R}_1$, ..., $\mathcal{R}_c$. Если оказывается, что $g_i(\mathbf{x})>g_j(\mathbf{x})$ для всех $j\neq i$, то считаем, что x находится в области $\mathcal{R}_i$ и, согласно решающему правилу, со значением x следует сопоставить состояние ω_i. Области разделяются *границами областей решений* — такими поверхностями в пространстве признаков, вдоль которых совпадают наибольшие (для каждой точки x.— *Ред.*) из разделяющих функций (рис. 2.4). Для соприкасающихся областей $\mathcal{R}_i$ и $\mathcal{R}_j$ уравнение разделяющей их границы имеет вид

$$g_i(\mathbf{x})=g_j(\mathbf{x}). \tag{14}$$

Хотя данное уравнение в зависимости от выбранного вида разделяющих функций может принимать различную форму, границы областей решений остаются, конечно, одними и теми же. Для точек, лежащих на границе, задача классификации определяется не единственным образом. В случае байесовского классификатора для каждого из решений получаем одно и то же значение условного риска, так что не важно, как будет разрешена эта неопределенность. Вообще говоря, данная проблема разрешения неопределенности при непрерывных функциях плотности условного распределения является чисто теоретической задачей.

2.5.2. СЛУЧАЙ ДВУХ КЛАССОВ

Хотя два класса — это лишь частный случай многих классов, обычно его исследуют отдельно. Вместо использования двух разделяющих функций g_1 и g_2 и сопоставления значений x и состояния

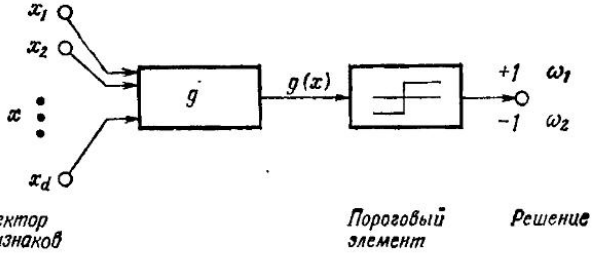


Рис. 2.5. Схема классификатора образов для двух классов.

ω_1 при $g_1>g_2$ чаще принято определять одну разделяющую функцию:

$$g(\mathbf{x})=g_1(\mathbf{x})-g_2(\mathbf{x}) \tag{15}$$

и применять следующее правило: принять решение ω_1, если $g(\mathbf{x})>0$; в противном случае — принять решение ω_2. Классификатор для

двух классов может, таким образом, рассматриваться как устройство, вычисляющее единственную разделяющую функцию $g(\mathbf{x})$ и классифицирующее $\mathbf{x}$ в соответствии с алгебраическим знаком результата (рис. 2.5). Из всевозможных видов записи разделяющей функции, дающей минимальный уровень ошибки, особенно удобны два:

$$g(\mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x}), \tag{16}$$

$$g(\mathbf{x}) = \log \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{p(\mathbf{x} \mid \omega_2)} + \log \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}. \tag{17}$$

2.6. ВЕРОЯТНОСТИ ОШИБОК И ИНТЕГРАЛЫ ОШИБОК

Представляя классификатор как устройство для разбиения пространства признаков на области решений, можно глубже разобраться в работе байесовского классификатора. Рассмотрим сначала

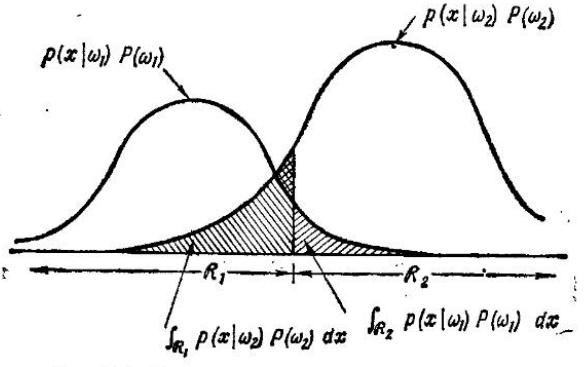


Рис. 2.6. Составляющие вероятности ошибки.

случай двух классов и предположим, что классификатор разделяет пространство на две области $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$. Возможны два типа ошибок классификации: когда наблюдаемое значение $\mathbf{x}$ попадает в область $\mathcal{R}_2$, в то время как истинное состояние природы есть ω_1, либо когда $\mathbf{x}$ попадает в $\mathcal{R}_1$, а истинное состояние природы — ω_2. Так как эти события взаимоисключающие и составляют полное множество событий, то

$$\begin{aligned} P(\text{ошибка}) &= P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_2,\ \omega_1) + P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_1,\ \omega_2) = \\ &= P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_2 \mid \omega_1) P(\omega_1) + P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_1 \mid \omega_2) P(\omega_2) = \\ &= \int_{\mathcal{R}_2} p(\mathbf{x} \mid \omega_1) P(\omega_1)\, d\mathbf{x} + \int_{\mathcal{R}_1} p(\mathbf{x} \mid \omega_2) P(\omega_2)\, d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{18}$$

Этот результат для одномерного случая иллюстрируется рис. 2.6. Два слагаемых в этом выражении, по существу, представляют площади, накрываемые «хвостами» функций $p(\mathbf{x} \mid \omega_i) P(\omega_i)$. В силу

произвольного выбора $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$ вероятность ошибки в примере не столь мала, как могла бы быть. Ясно, что, смещая границу области решений влево, можно свести на нет площадь темного «треугольника» и тем самым уменьшить вероятность ошибки. Вообще, если $p(\mathbf{x}|\omega_1)P(\omega_1) > p(\mathbf{x}|\omega_2)P(\omega_2)$, то выгоднее иметь $\mathbf{x}$ в области $\mathcal{R}_1$, чтобы вклад в интеграл был меньше; именно это и достигается применением байесовского решающего правила.

В случае многих классов больше возможностей допустить ошибку, чем оказаться правым, так что проще вычислять вероятность верного решения. Ясно, что

$$\begin{aligned} P\ (\text{отсутствие ошибки}) &= \sum_{i=1}^{c} P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_i,\ \omega_i) = \\ &= \sum_{i=1}^{c} P(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_i \,|\, \omega_i)\, P(\omega_i) = \\ &= \sum_{i=1}^{c} \int_{\mathcal{R}_i} p(\mathbf{x} \,|\, \omega_i)\, P(\omega_i)\, d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{19}$$

Полученный результат остается в силе независимо от способа разбиения пространства признаков на области решений. Байесовский классификатор делает эту вероятность максимальной за счет выбора областей, для которых интегрируемые величины наибольшие, так что никакое другое разбиение не приведет к меньшей вероятности ошибки.

2.7. НОРМАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ

Структура байесовского классификатора определяется в основном типом условных плотностей $p(\mathbf{x}|\omega_i)$. Из множества исследованных функций плотности наибольшее внимание было уделено многомерной нормальной плотности распределения. Следует признать, что это вызвано в основном удобством ее аналитического вида. Вместе с тем многомерная нормальная плотность распределения дает подходящую модель для одного важного случая, а именно когда значения векторов признаков $\mathbf{x}$ для данного класса ω_i представляются непрерывнозначными, слегка искаженными версиями единственного типичного вектора, или вектора-прототипа, μ_i. Именно этого ожидают, когда классификатор выбирается так, чтобы выделять те признаки, которые, будучи различными для образов, принадлежащих различным классам, были бы, возможно, более схожи для образов из одного и того же класса. В данном разделе приводится краткое описание свойств многомерной нормальной плотности распределения, причем особое внимание уделяется тем из них, которые представляют наибольший интерес для задач классификации.

2.7.1. ОДНОМЕРНАЯ НОРМАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ

Рассмотрим сначала одномерную нормальную функцию плотности

$$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right], \tag{20}$$

для которой

$$E[x]=\int_{-\infty}^{\infty} xp(x)\,dx=\mu \tag{21}$$

и

$$E[(x-\mu)^2]=\int_{-\infty}^{\infty}(x-\mu)^2 p(x)\,dx=\sigma^2. \tag{22}$$

Одномерная нормальная плотность распределения полностью определяется двумя параметрами — *средним значением* μ и *дисперсией* σ^2. Для простоты уравнение (20) часто записывается в виде $p(x)\sim N(\mu, \sigma^2)$, что означает, что величина x распределена нормально со средним значением μ и дисперсией σ^2. Значения нормально распределенной величины группируются около ее среднего значения с разбросом, пропорциональным стандартному отклонению σ; при испытаниях примерно 95% значений нормально распределенной величины будет попадать в интервал $|x-\mu|\leqslant 2\sigma$.

2.7.2. МНОГОМЕРНАЯ НОРМАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ

Многомерная нормальная плотность распределения в общем виде представляется выражением

$$p(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right], \tag{23}$$

где $\mathbf{x}$ есть d-компонентный вектор-столбец, $\boldsymbol{\mu}$ есть d-компонентный *вектор среднего значения*, Σ — *ковариационная матрица* размера $d\times d$, $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t$ — транспонированный вектор $\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}$, Σ^{-1} — матрица, обратная Σ, а $|\Sigma|$ — детерминант матрицы Σ. Для простоты выражение (23) часто записывается сокращенно в виде $p(\mathbf{x})\sim N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$. Формально можно написать

$$\boldsymbol{\mu}=E[\mathbf{x}] \tag{24}$$

и

$$\Sigma=E[(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t], \tag{25}$$

где ожидаемое значение вектора или матрицы находится поэлементным вычислением математических ожиданий компонент. Выражаясь конкретнее, если x_i есть i-я компонента $\mathbf{x}$, μ_i есть i-я компонента $\boldsymbol{\mu}$, а σ_{ij} есть $(i\text{-}j)$-я компонента Σ, то получаем

$$\mu_i=E[x_i] \tag{26}$$

и

$$\sigma_{ij}=E[(x_i-\mu_i)(x_j-\mu_j)]. \tag{27}$$

Ковариационная матрица Σ всегда симметрична и положительно полуопределена. Ограничимся рассмотрением случаев, когда Σ положительно определена, так что ее детерминант строго положителен [1]). Диагональный элемент σ_{ii} есть дисперсия x_i, а недиагональный элемент σ_{ij} есть ковариация x_i и x_j. Если x_i и x_j статистически независимы, то $\sigma_{ij}=0$. Если все недиагональные элементы равны нулю, то $p(\mathbf{x})$ сводится к произведению одномерных нормальных плотностей компонент вектора $\mathbf{x}$.

Нетрудно показать, что любая линейная комбинация нормально распределенных случайных величин также распределена нормально. В частности, если A есть матрица размера $d\times n$, а $\mathbf{y}=A^t\mathbf{x}$ есть n-компонентный вектор, то $p(\mathbf{y})\sim N(A^t\boldsymbol{\mu}, A^t\Sigma A)$. В частном случае, если A есть вектор единичной длины $\mathbf{a}$, то величина $y=A^t\mathbf{x}$ является скаляром, представляющим проекцию вектора $\mathbf{x}$ на направление $\mathbf{a}$. Таким образом, $\mathbf{a}^t\Sigma\mathbf{a}$ есть дисперсия проекции $\mathbf{x}$ на $\mathbf{a}$. Вообще знание ковариационной матрицы дает возможность вычислить дисперсию вдоль любого направления.

Многомерная нормальная плотность распределения полностью определяется $d+d(d+1)/2$ параметрами — элементами вектора среднего значения $\boldsymbol{\mu}$ и независимыми элементами ковариационной матрицы Σ. Выборки нормально распределенной случайной величины имеют тенденцию попадать в одну область или кластер (рис. 2.7). Центр кластера определяется вектором среднего значения, а форма — ковариационной матрицей. Из соотношения (23) следует, что точки постоянной плотности образуют гиперэллипсоиды, для которых квадратичная форма $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$ постоянна. Главные оси этих гиперэллипсоидов задаются собственными векторами Σ, причем длины осей определяются собственными значениями. Величину

$$r^2=(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) \tag{28}$$

иногда называют квадратичным *махаланобисовым расстоянием* от $\mathbf{x}$ до $\boldsymbol{\mu}$. Линии постоянной плотности, таким образом, представляют собой гиперэллипсоиды постоянного махаланобисова расстояния до $\boldsymbol{\mu}$. Объем этих гиперэллипсоидов служит мерой разброса выборок относительно среднего значения. Можно показать, что объем гиперэллипсоида, соответствующего махаланобисову расстоянию r, равен

$$V=V_d|\Sigma|^{1/2}r^d, \tag{29}$$

[1]) Если выборки значений нормально распределенной величины принадлежат некоторому линейному подпространству, то $|\Sigma|=0$, и $p(\mathbf{x})$ вырождено. Это случается, если, например, одна из компонент вектора $\mathbf{x}$ обладает нулевой дисперсией либо две компоненты оказываются идентичными. Мы специально исключаем такие случаи.

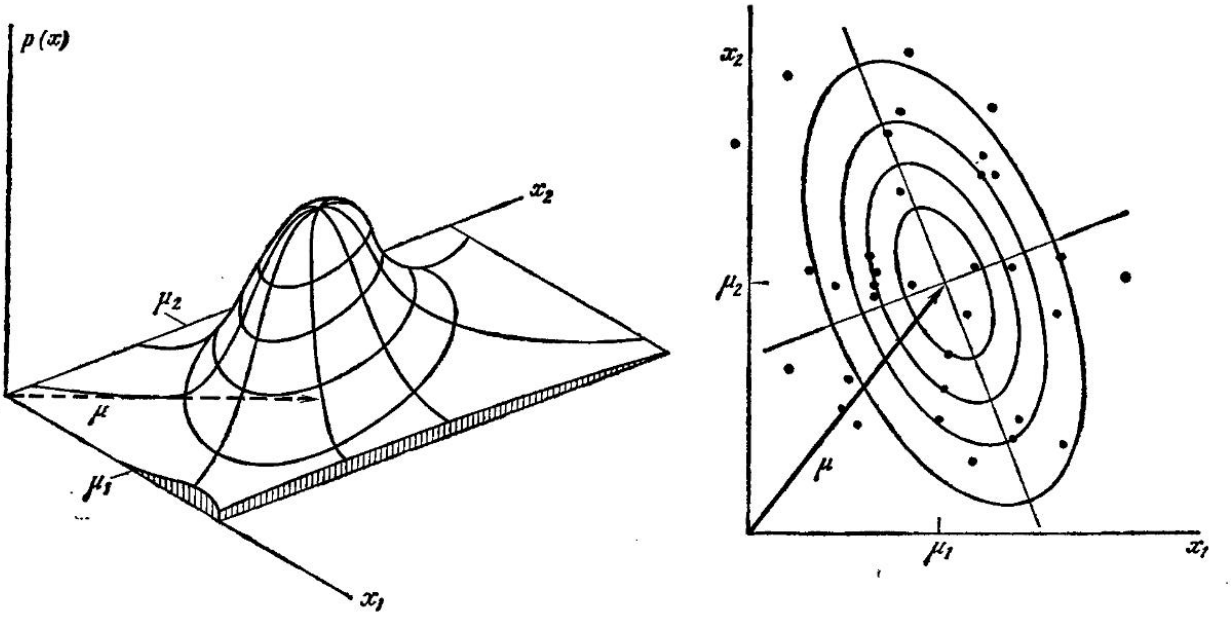


Рис. 2.7. Представление нормальной плотности
а — в виде функции двух переменных,
б — на диаграмме разброса.

где V_d есть объем d-мерной единичной гиперсферы, равный

$$V_d = \begin{cases} \dfrac{\pi^{d/2}}{\left(\frac{d}{2}\right)!} & \text{при четном } d, \\ \dfrac{2^d \pi^{(d-1)/2} \left(\frac{d-1}{2}\right)!}{d!} & \text{при нечетном } d. \end{cases} \tag{30}$$

Таким образом, при заданной размерности разброс выборок изменяется пропорционально величине $|\Sigma|^{1/2}$.

2.8. РАЗДЕЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ ДЛЯ СЛУЧАЯ НОРМАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ

Как мы видели в разд. 2.5, классификация с минимальным уровнем ошибки может осуществляться посредством разделяющих функций вида

$$g_i(\mathbf{x}) = \log p(\mathbf{x}|\omega_i) + \log P(\omega_i). \tag{13}$$

Это выражение легко оценивается в случае, когда многомерная плотность $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ нормальна. Пусть $p(\mathbf{x}|\omega_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i \Sigma_i)$. Тогда, согласно выражению (23), имеем

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) - \frac{d}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log|\Sigma_i| + \log P(\omega_i). \tag{31}$$

Рассмотрим этот результат в некоторых частных случаях.

2.8.1. СЛУЧАЙ 1: $\Sigma_i = \sigma^2 I$

Эта простейшая ситуация возникает тогда, когда признаки статистически независимы и имеют одинаковую дисперсию σ^2. Ковариационная матрица при этом становится диагональной, превращаясь в произведение σ^2 на единичную матрицу I. Выборки при этом попадают внутрь одинаковых гиперсферических кластеров, причем каждый кластер i-го класса имеет своим центром вектор средних значений $\boldsymbol{\mu}_i$. Здесь значительно упрощается расчет определителя и матрицы, обратной Σ_i; они равны соответственно $|\Sigma_i| = \sigma^{2d}$ и $\Sigma_i^{-1} = (1/\sigma^2)I$. В соотношении (31) можно пренебречь несущественными постоянными слагаемыми $|\Sigma_i|$ и $(d/2)\log 2\pi$, так как их значения не зависят от i. В результате разделяющие функции принимают простой вид:

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i\|^2}{2\sigma^2} + \log P(\omega_i), \tag{32}$$

где $\|\cdot\|$ — евклидова норма, т. е.

$$\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i\|^2=(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i). \tag{33}$$

Если для всех c классов априорные вероятности $P(\omega_i)$ равны, то слагаемое $\log P(\omega_i)$ также становится несущественной аддитивной константой, которой можно пренебречь. Оптимальное решающее правило формулируется в этом случае очень просто: чтобы определить класс вектора признаков $\mathbf{x}$, следует измерить евклидово расстояние $\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i\|$ от $\mathbf{x}$ до каждого из c векторов средних значений и отнести $\mathbf{x}$ к классу, соответствующему ближайшему среднему значению. Такой классификатор называют классификатором *по минимуму расстояния*. Если каждый из векторов средних значений считать идеальным прототипом или эталоном для образов своего класса, то это по существу будет процедура *сравнения с эталоном*. Если априорные вероятности не равны, то, согласно соотношению (32), квадрат расстояния $\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i\|^2$ должен быть нормирован по дисперсии σ^2 и смещен на величину $\log P^2(\omega_i)$; поэтому в случае, когда $\mathbf{x}$ одинаково близок к двум различным векторам средних значений, при принятии решения следует предпочесть класс, априорно более вероятный.

На самом деле нет необходимости вычислять расстояние в каждом из этих случаев. Раскрытие квадратичной формы $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$ приводит к выражению

$$g_i(\mathbf{x})=-\frac{1}{2\sigma^2}[\mathbf{x}^t\mathbf{x}-2\boldsymbol{\mu}_i^t\mathbf{x}+\boldsymbol{\mu}_i^t\boldsymbol{\mu}_i]+\log P(\omega_i),$$

являющемуся квадратичной функцией $\mathbf{x}$. Вместе с тем квадратичный член $\mathbf{x}^t\mathbf{x}$, неизменный для любого i, представляет собой постоянное слагаемое, и им можно пренебречь. В результате получаем эквивалентную *линейную* разделяющую функцию вида

$$g_i(\mathbf{x})=\mathbf{w}_i^t\mathbf{x}+w_{i0}, \tag{34}$$

где [1])

$$\mathbf{w}_i=\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_i \tag{35}$$

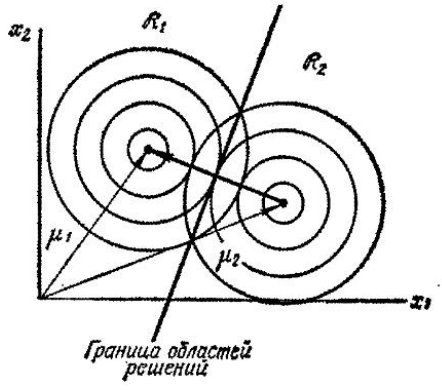
и

$$w_{i0}=-\frac{1}{2\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_i^t\boldsymbol{\mu}_i+\log P(\omega_i). \tag{36}$$

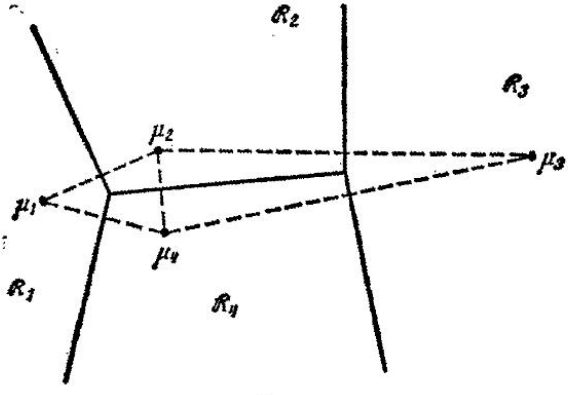
Классификатор, основанный на использовании линейных разделяющих функций, называется *линейной машиной*. Классификатор

---

[1]) Читатели, знакомые с теорией выделения сигналов, узнают здесь корреляционный детектор. Разделяющая функция $g_i(\mathbf{x})$ определяет взаимную корреляцию входной величины $\mathbf{x}$ и заданного опорного сигнала $\boldsymbol{\mu}_i$. Константой w_{i0} учитывается как энергия опорного сигнала, так и априорная вероятность его появления.



а



б

Рис. 2.8. Границы областей решений при использовании классификатора по минимуму расстояния.

а — задача для двух классов,
б — задача для четырех классов.

этого типа обладает многими свойствами, интересными с теоретической точки зрения; некоторые из них будут подробно обсуждаться в гл. 5. Здесь же заметим просто, что поверхности решений в случае линейной машины явятся частями гиперплоскостей, определяемых линейными уравнениями $g_i(\mathbf{x})=g_j(\mathbf{x})$. Для данного частного случая это уравнение можно записать в виде

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)=0, \tag{37}$$

где

$$\mathbf{w}=\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j \tag{38}$$

и

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i + \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{\sigma^2}{\|\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j\|^2} \log \frac{P(\omega_i)}{P(\omega_j)} (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j). \qquad (39)$$

Это уравнение определяет ортогональную вектору $\mathbf{w}$ гиперплоскость, проходящую через точку $\mathbf{x}_0$. Поскольку $\mathbf{w}=\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j$, гиперплоскость, разделяющая $\mathcal{R}_i$ и $\mathcal{R}_j$, будет ортогональна прямой, соединяющей средние значения. Если $P(\omega_i)=P(\omega_j)$, то точка $\mathbf{x}_0$ находится посередине между средними значениями, а гиперплоскость проходит через середину отрезка, соединяющего средние значения перпендикулярно ему (рис. 2.8). Этого следовало бы ожидать по той причине, что классификатор в данном случае есть классификатор по минимуму расстояния. Если $P(\omega_i) \neq P(\omega_j)$, то точка $\mathbf{x}_0$ смещается, удаляясь от более вероятного среднего значения. Вместе с тем следует заметить, что если дисперсия σ^2 мала по сравнению с квадратом расстояния $\|\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j\|^2$, то положение границы областей решений сравнительно мало зависит от точных значений априорных вероятностей.

2.8.2. СЛУЧАЙ 2: $\Sigma_i=\Sigma$

В другом простом случае ковариационные матрицы для всех классов одинаковы. Геометрически это соответствует ситуации, при которой выборки попадают внутрь гиперэллипсоидальных областей (кластеров) одинаковых размеров и формы, с вектором средних значений в центре каждой. Не зависящими от i слагаемыми $|\Sigma_i|$ и $(d/2)\log 2\pi$ в соотношении (31) можно пренебречь. В результате получаем разделяющие функции вида

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) + \log P(\omega_i). \qquad (40)$$

Если априорные вероятности $P(\omega_i)$ для всех c классов равны, то слагаемым $\log P(\omega_i)$ можно пренебречь. Оптимальное решающее правило в этом случае снова оказывается очень простым: для классификации вектора признаков следует определить квадратичное махаланобисово расстояние $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$ от $\mathbf{x}$ до каждого из c векторов средних значений и отнести $\mathbf{x}$ к классу, соответствующему ближайшему среднему значению [1]). Как и прежде, в случае неравных априорных вероятностей, при принятии решения несколько большее предпочтение отдается классу, априорно более вероятному.

[1]) К альтернативной интерпретации можно прийти, подвергая координаты признаков линейному преобразованию с таким изменением масштабов и поворотом осей, при котором гиперэллипсоиды постоянного махаланобисова расстояния превратятся в гиперсферы. Такое преобразование упрощает задачу, сводя ее к случаю, рассмотренному в предыдущем разделе, и позволяя махаланобисово расстояние рассматривать в преобразованном пространстве как евклидово.

При раскрытии квадратичной формы $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$ обнаруживается, что квадратичное слагаемое $\mathbf{x}^t\Sigma^{-1}\mathbf{x}$ не зависит от i. Исключая его, снова получим линейные разделяющие функции вида

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^t\mathbf{x} + w_{i0}, \quad (41)$$

где

$$\mathbf{w}_i = \Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu}_i \quad (42)$$

и

$$w_{i0} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i^t\Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu}_i + \log P(\omega_i). \quad (43)$$

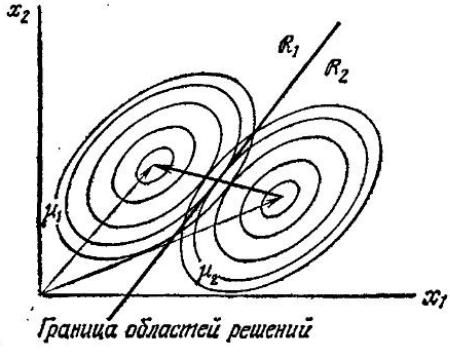


Рис. 2.9. Граница областей решений при использовании классификатора по минимуму махаланобисова расстояния.

Так как разделяющие функции линейны, границы областей решений в этом случае становятся гиперплоскостями (рис. 2.9). Для смежных $\mathcal{R}_i$ и $\mathcal{R}_j$ граница между ними описывается уравнением

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0) = 0, \quad (44)$$

где

$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j) \quad (45)$$

и

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i + \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{\log\dfrac{P(\omega_i)}{P(\omega_j)}}{(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)^t\Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j). \quad (46)$$

Так как направление вектора $\mathbf{w} = \Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)$ в общем случае не совпадает с направлением $\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j$, то гиперплоскость, разделяющая $\mathcal{R}_i$ и $\mathcal{R}_j$, вообще говоря, не ортогональна отрезку, соединяющему средние значения. Вместе с тем в случае равных априорных вероятностей она пересекает этот отрезок в точке $\mathbf{x}_0$, находящейся посередине между средними значениями. При неравных априорных вероятностях граничная гиперплоскость смещается, удаляясь от более вероятного среднего значения.

2.8.3. СЛУЧАЙ 3: ПРОИЗВОЛЬНЫЕ Σ_i

В общем случае многомерного нормального распределения ковариационные матрицы для каждого класса различны. В выражении (31) можно пренебречь только слагаемым $(d/2)\log 2\pi$, так что получаемые разделяющие функции оказываются существенно квадратичными:

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^t\mathbf{W}_i\mathbf{x} + \mathbf{w}_i^t\mathbf{x} + w_{i0}, \quad (47)$$

где

$$W_i = -\frac{1}{2}\Sigma_i^{-1}, \tag{48}$$

$$\mathbf{w}_i = \Sigma_i^{-1}\boldsymbol{\mu}_i, \tag{49}$$

$$w_{i0} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i^t\Sigma_i^{-1}\boldsymbol{\mu}_i - \frac{1}{2}\log|\Sigma_i| + \log P(\omega_i). \tag{50}$$

Границы областей решений представляют собой *гиперквадрики* и могут принимать любую из общих форм — гиперплоскостей,

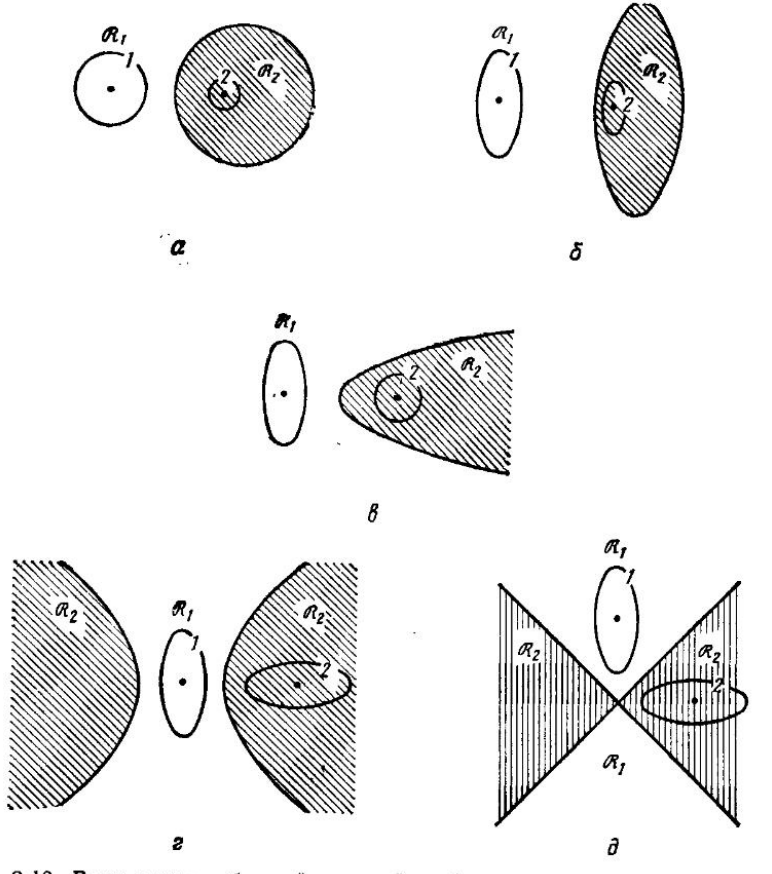


Рис. 2.10. Виды границ областей решений в общем случае двумерного нормального распределения.
а — круг, *б* — эллипс, *в* — парабола, *г* — гипербола, *д* — прямые.

гиперсфер, гиперэллипсоидов, гиперпараболоидов или разного вида гипергиперболоидов. То, каким образом могут возникнуть эти различные виды гиперквадрик, изображено для двумерного случая

на рис. 2.10. Так как переменные x_1, x_2 независимы для фиксированного класса, их ковариационные матрицы диагональны. Поверхности решений различаются исключительно из-за различия между дисперсиями. Сами дисперсии обозначены пронумерованными контурами постоянной плотности вероятности. На рис. 2.10 (а) дисперсии для $p(\mathbf{x}|\omega_2)$ меньше, чем для $p(\mathbf{x}|\omega_1)$. Поэтому более вероятно, что выборки, принадлежащие классу 2, окажутся вблизи среднего значения для этого класса, а из-за центральной симметрии граница решения образует окружность, внутри которой лежит μ_2. При растяжении оси x_2, как показано на рис. 2.10 (б), граница решения вытягивается в эллипс. Рис. 2.10 (в) иллюстрирует случай, когда обе плотности имеют одинаковые дисперсии в направлении x_1, но в направлении x_2 дисперсия для $p(\mathbf{x}|\omega_1)$ больше, чем для $p(\mathbf{x}|\omega_2)$. Таким образом, выборки с большим x_2, вероятнее, принадлежат классу 1, а граница решения представляет собой параболу. С ростом x_1 дисперсия для $p(\mathbf{x}|\omega_2)$ меняется как на рис. 2.10 (г) и граница превращается в гиперболу. Наконец, особый случай симметрии, когда гиперболическая граница вырождается в пару прямых, приведен на рис. 2.10 (д).

2.9. БАЙЕСОВСКАЯ ТЕОРИЯ РЕШЕНИЙ — ДИСКРЕТНЫЙ СЛУЧАЙ

До сих пор предполагалось, что вектор признаков $\mathbf{x}$ может быть любой точкой d-мерного евклидова пространства. На практике компоненты вектора $\mathbf{x}$ часто оказываются бинарными или тернарными переменными, так что $\mathbf{x}$ может принять одно из m дискретных значений $\mathbf{v}_1$, ..., $\mathbf{v}_m$. Функция плотности $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ в таких случаях становится сингулярной, а интегралы вида

$$\int p(\mathbf{x}|\omega_j)\,d\mathbf{x}$$

превращаются в суммы

$$\sum_k P(\mathbf{v}_k|\omega_j),$$

где $P(\mathbf{v}_k|\omega_j)$ — условная вероятность того, что $\mathbf{x}=\mathbf{v}_k$ при условии, что состояние природы есть ω_j. Байесовское правило принимает вид

$$P(\omega_j|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}|\omega_j)P(\omega_j)}{P(\mathbf{x})}, \tag{51}$$

где

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{s} P(\mathbf{x}|\omega_j)P(\omega_j). \tag{52}$$

Определение условного риска $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ при этом не изменяется, так что основное байесовское решающее правило остается прежним: для того чтобы общий риск был наименьшим, следует выбирать такое действие α_i, для которого $R(\alpha_i|\mathbf{x})$ минимален. Основное пра-

вило минимизации уровня ошибки посредством максимизации апостериорной вероятности также не изменяется, так что, пользуясь правилом Байеса, получим следующие эквивалентные разделяющие функции:

$$g_i(\mathbf{x}) = P(\omega_i \mid \mathbf{x}), \tag{53}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x} \mid \omega_i)\, P(\omega_i), \tag{54}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \log P(\mathbf{x} \mid \omega_i) + \log P(\omega_i). \tag{55}$$

Для случая двух классов часто более удобны разделяющие функции вида

$$g(\mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x}), \tag{56}$$

$$g(\mathbf{x}) = \log \frac{P(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{P(\mathbf{x} \mid \omega_2)} + \log \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}. \tag{57}$$

2.10. НЕЗАВИСИМЫЕ БИНАРНЫЕ ПРИЗНАКИ

В качестве примера типичной задачи классификации при дискретных значениях признаков рассмотрим случай двух классов, в каждом из которых компоненты вектора бинарны и условно независимы. Пусть для определенности $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_d)^t$, где компоненты вектора $\mathbf{x}$ равны либо 1, либо 0, причем

$$p_i = \Pr(x_i = 1 \mid \omega_1)$$

и

$$q_i = \Pr(x_i = 1 \mid \omega_2).$$

Это модель задачи классификации, в которой каждый из признаков несет ответ типа «да» — «нет». В случае $p_i > q_i$ следует ожидать, что i-й признак будет чаще давать ответ «да» при состоянии природы ω_1, нежели при ω_2. В предположении условной независимости можно записать $P(\mathbf{x} \mid \omega_i)$ в виде произведения вероятностей для компонент $\mathbf{x}$. Записать это удобнее следующим образом:

$$P(\mathbf{x} \mid \omega_1) = \prod_{i=1}^{d} p_i^{x_i} (1 - p_i)^{1 - x_i},$$

$$P(\mathbf{x} \mid \omega_2) = \prod_{i=1}^{d} q_i^{x_i} (1 - q_i)^{1 - x_i}.$$

Отношение правдоподобия при этом определяется выражением

$$\frac{P(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{P(\mathbf{x} \mid \omega_2)} = \prod_{i=1}^{d} \left(\frac{p_i}{q_i}\right)^{x_i} \left(\frac{1 - p_i}{1 - q_i}\right)^{1 - x_i},$$

а из (57) получим выражение для разделяющей функции

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} \left[x_i \log \frac{p_i}{q_i} + (1 - x_i) \log \frac{1 - p_i}{1 - q_i} \right] + \log \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}.$$

Видно, что данное уравнение линейно относительно x_i. Таким образом, можно написать

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + w_0,$$

где

$$w_i = \log \frac{p_i(1-q_i)}{q_i(1-p_i)}, \quad i = 1, \ldots, d,$$

и

$$w_0 = \sum_{i=1}^{d} \log \frac{1-p_i}{1-q_i} + \log \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}.$$

Посмотрим, к каким выводам можно прийти на основанин полученных результатов. Напомним прежде всего, что в случае $g(\mathbf{x})>0$ принимается решение ω_1, а в случае $g(\mathbf{x})\leqslant 0$ — решение ω_2. Мы уже убедились, что $g(\mathbf{x})$ представляет собой взвешенную комбинацию компонент вектора $\mathbf{x}$. Величиной веса w_i измеряется значимость ответа «да» для x_i при классификации. Если $p_i=q_i$, то величина x_i не несет информации о состоянии природы, так что $w_i=0$. В случае $p_i>q_i$ имеем $1-p_i<1-q_i$, так что вес w_i положителен. Следовательно, в этом случае ответ «да» для x_i дает w_i голосов в пользу ω_1. Кроме того, при любом постоянном $q_i<1$, чем больше p_i, тем больше и w_i. С другой стороны, при $p_i<q_i$ величина w_i становится отрицательной, и ответ «да» дает $|w_i|$ голосов в пользу ω_2.

Величины априорных вероятностей $P(\omega_i)$ проявляются в выражении разделяющих функций только через так называемый пороговый вес w_0. Увеличение $P(\omega_1)$ приводит к увеличению w_0, склоняя решение к ω_1, тогда как уменьшение $P(\omega_1)$ оказывает противоположное действие. Геометрически векторы $\mathbf{v}_k$ можно представить вершинами d-мерного гиперкуба. Поверхность решения, определяемая уравнением $g(\mathbf{x})=0$, представляет собой гиперплоскость, отделяющую вершины ω_1 от вершин ω_2. Положение этой гиперплоскости в дискретном случае можно, очевидно, изменять множеством способов, не пересекая вершин и не изменяя вероятности ошибки. Каждая из этих гиперплоскостей представляет оптимальную разделяющую поверхность, обеспечивая оптимальный образ действия.

2.11. СОСТАВНАЯ БАЙЕСОВСКАЯ ЗАДАЧА ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ И КОНТЕКСТ

Вернемся к ранее рассмотренному примеру разработки классификатора для сортировки двух видов древесины — ясеня и березы. Первоначально было принято, что последовательность видов древесины настолько непредсказуема, что состояние природы представляется чисто случайной переменной. Не отказываясь от этого, предположим, что последовательные состояния природы могут и

не быть статистически независимыми. Например, если даже априорные вероятности для ясеня и березы оказываются равными, то может оказаться, что при появлении некоторого куска древесины более вероятно, что несколько последующих кусков будут того же самого вида. В этом случае последовательные состояния природы находятся в некоторой зависимости, которую можно использовать для улучшения образа действия. Это один из примеров ориентации *на контекст* при выборе решения.

Способ использования такой информации будет несколько варьироваться в зависимости от того, есть ли возможность дожидаться выхода n кусков древесины, после чего принимать все n решений сразу, или же принимать решение надо при появлении каждого куска древесины. Первая задача называется *составной задачей принятия решений*, а вторая — *последовательной составной задачей принятия решений*. Рассмотрим первый случай как более наглядный.

Для формулировки задачи в общем виде обозначим n состояний природы вектором $\boldsymbol{\omega} = (\omega(1), \ldots, \omega(n))^t$, где $\omega(i)$ относится к одному из c значений $\omega_1, \ldots, \omega_c$. Пусть $P(\boldsymbol{\omega})$ есть априорная вероятность n состояний природы. Пусть $X = (\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n)$ есть матрица, определяющая n наблюдаемых векторов признаков, где $\mathbf{x}_i$ есть вектор признаков, получаемый при состоянии природы $\omega(i)$. И наконец, пусть $p(X|\boldsymbol{\omega})$ — функция плотности условного распределения величины X при условии, что множество состояний природы есть $\boldsymbol{\omega}$. В этом случае апостериорная вероятность состояния $\boldsymbol{\omega}$ определяется выражением

$$P(\boldsymbol{\omega} \mid X) = \frac{p(X \mid \boldsymbol{\omega}) P(\boldsymbol{\omega})}{p(X)}, \tag{58}$$

где

$$p(X) = \sum_{\boldsymbol{\omega}} p(X \mid \boldsymbol{\omega}) P(\boldsymbol{\omega}). \tag{59}$$

Для составной задачи принятия решений в общем случае можно определить матрицу потерь и отыскивать решающее правило, минимизирующее составной риск. Данная теория строится по аналогии с ранее рассмотренной простой задачей принятия решения, приводя в итоге к тому, что оптимальная процедура состоит в минимизации составного условного риска. В частном случае, если при правильном решении потери отсутствуют и если все ошибки имеют одинаковую цену, то процедура сводится к вычислению $P(\boldsymbol{\omega}|X)$ для всех $\boldsymbol{\omega}$ и выбору такого $\boldsymbol{\omega}$, апостериорная вероятность которого наибольшая.

Так как при этом требуется проделать все необходимые вычисления для определения $P(\boldsymbol{\omega}|X)$, задача на практике часто оказывается чересчур громоздкой. Если каждая из компонент $\omega(i)$ может принимать одно из c значений, то необходимо рассмотреть c^n воз-

можных значений ω. Задача несколько упрощается в случае, когда распределение вектора признаков $\mathbf{x}_i$ зависит от соответствующего состояния природы $\omega(i)$ и не зависит от других векторов признаков и состояний природы. Общая плотность $p(X|\omega)$ определяется при этом просто произведением плотностей компонент $p(\mathbf{x}_i|\omega(i))$:

$$p(X \mid \omega) = \prod_{i=1}^{n} p(\mathbf{x}_i \mid \omega(i)). \tag{60}$$

Таким образом, вычисление $p(X|\omega)$ при этом упрощается, однако все еще сохраняются трудности определения априорной вероятности $P(\omega)$. Эта вероятность, отражающая взаимосвязь состояний природы, лежит в основе составной байесовской задачи принятия решения. Поэтому задачу вычисления $P(\omega)$ нельзя упрощать, вводя предположение о независимости состояний природы. Кроме того, на практике обычно стараются каким-нибудь способом избавиться от вычисления $P(\omega|X)$ для всех c^n возможных значений ω.

Оставим эти задачи предметом для дополнительных раздумий, а читателей, интересующихся дальнейшими подробностями, отошлем к соответствующей литературе.

2.12. ПРИМЕЧАНИЯ

Таким образом, мы закончили изложение байесовской теории решений, остановившись особо на случае многомерного нормального распределения. Соображения, положенные в ее основу, весьма просты. Для того чтобы сделать общий риск минимальным, необходимо выбирать такое действие, при котором будет минимален условный риск, соответствующий выражению

$$R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{c} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x}).$$

В частности, чтобы сделать минимальной вероятность ошибки при классификации, следует всегда выбирать такое из состояний природы, для которого апостериорная вероятность $P(\omega_j|\mathbf{x})$ имеет наибольшее значение. Величины апостериорных вероятностей в соответствии с правилом Байеса определяются по априорным вероятностям $P(\omega_j)$ и условным плотностям $p(\mathbf{x}|\omega_j)$.

Основная трудность использования этих рекомендаций состоит в том, что в большинстве прикладных задач неизвестны условные плотности $p(\mathbf{x}|\omega_j)$. В некоторых случаях можно предположить некоторый вид функций плотности, однако значения характеризующих их параметров остаются неизвестными. Типичен, например, случай, когда либо известно, либо можно предположить, что плотности распределений имеют вид плотностей многомерных нормаль-

ных распределений, но векторы средних значений и ковариационные матрицы неизвестны. Чаще же об условных плотностях известно еще меньше, и нужно обращаться к процедурам, в которых конкретные предложения относительно плотностей меньше влияют на результаты.

Большинство последующих разделов части I данной книги как раз и будут посвящены различным процедурам, разработанным для решения этой проблемы.

2.13. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Теория принятия решений связывается с именами многих известных математиков-статистиков, так что этому вопросу посвящено большое число научных работ. Среди общепринятых учебников по теории принятия решений имеются работы Вальда (1950), Блекуэлла и Гиршика (1954) и более элементарная книга Чернова и Мозеса (1959). Интерес представляет также работа Фергюсона (1967), в которой рассматривается ряд вопросов статистики с точки зрения принятия решений. Теория принятия решений тесно связана с теорией игр, развитой в классическом труде Неймана и Моргенштерна (1944) и в работе Льюса и Райфы (1957).

Основополагающий труд по теории принятия решений Неймана и Пирсона (1928, 1933) посвящен вопросам проверки гипотез, с использованием в качестве критерия вероятности ошибки. Дальнейшее развитие эта теория получила у Вальда (1939), который ввел понятия потерь и риска. Определенный круг задач связан с использованием функций потерь и априорных вероятностей. На практике же многие статистики не применяют байесовский подход отчасти из-за того, что имеют дело с задачами, решение в которых принимается лишь однажды (в связи с чем теряет смысл понятие средних потерь), отчасти из-за отсутствия приемлемого способа определения априорных вероятностей. Ни одно из указанных обстоятельств не представляет серьезных трудностей при решении типичной задачи распознавания образов, поэтому классический байесовский подход в данном случае наиболее прост и целесообразен.

Чоу (1957) одним из первых применил байесовскую теорию принятия решений к задаче распознавания образов. В свой анализ он ввел отказ от принятия решения, а в дальнейшем установил основное соотношение между величинами ошибки и коэффициентом отказов (Чоу, 1970). Точный расчет вероятности ошибки весьма сложен, в связи с чем большинство опубликованных результатов связано с определением границ для уровня ошибки (Альбрехт и Вернер, 1964; Ча и Чуи, 1967; Лейниотис и Парк, 1971). Разделяющие функции к задаче классификаций были применены Фишером (1936); его подход будет рассмотрен в гл. 4. Мы используем это понятие, следуя Нильсону (1965). Андерсон (1958) детально ис-

следовал случай многомерного нормального распределения и получил квадратичные разделяющие функции несколько иного вида. Мэрилл и Грин (1960) показали, как можно применить это решение при распознавании образов. Купер (1964) исследовал другие непрерывные распределения, для которых применение линейных и квадратичных разделяющих функций является оптимальным.

Согласно Нильсону (1965), линейные разделяющие функции для случая двоичных независимых переменных (и многомерных, распределенных по закону Бернулли) получены Дж. В. Джонсом, хотя впервые публикации по этому вопросу появились у Минского (1961) и в дальнейшем с различными обоснованиями опубликованы Уиндером (1963) и Чоу (1965). Казмирчаком и Штейнбухом (1963) получены оптимальные квадратичные разделяющие функции для случая тернарных независимых переменных; случай этот легко обобщить для вывода полиномиальных разделяющих функций n-й степени, определяющих условия оптимальности для случая $(n+1)$-арных независимых переменных. Если не требовать независимости переменных, то даже для случая бинарных переменных понадобятся полиномы более высоких степеней. После разбора в гл. 4 полиномиальных представлений совместных вероятностей вопрос этот станет более ясным.

Высокая степень полиномов, содержащих большое количество переменных, естественно, нежелательна из-за усложнения расчетов. Поэтому в случаях, когда оптимальная разделяющая функция нелинейна, тем не менее возникает потребность найти оптимальную линейную разделяющую функцию. Однако часто выявляются весьма серьезные трудности при выводе линейной разделяющей функции, удовлетворяющей требованию минимального риска. Кроме полученного Андерсоном и Бахадуром (1962) решения общего многомерного нормального случая для двух классов, других общих решений получено не было. Вместе с тем, как будет показано в гл. 5, решения многих задач можно найти, применяя другие критерии, помимо критерия минимума риска.

Общая байесовская теория составных решений связана с более разнообразными задачами, нежели ранее описанная простая байесовская теория. Объяснение основных положений теории составных решений дано Абендом (1966); им же приведен ряд важных ссылок на соответствующие работы по статистике. Оптимальные процедуры распознавания для случая марковской зависимости состояний природы предложены Равивом (1967) и Абендом (1968), причем Равив сообщает о результатах применения этих процедур при распознавании стандартного английского текста. В работе Абенда, Харли и Кенала (1965) показано, как можно распространить марковский подход с одномерной ситуации на двумерные. Эффективная с точки зрения удобства вычислений методика описана Райзманом

и Эрихом (1971), указавшими на ряд работ по учету контекста в распознавании.

Заметим в заключение, что в части I данной книги везде молчаливо подразумевается, что до того, как принимается решение, производится измерение всех d компонент вектора признаков. Возможен и другой способ, с использованием дерева решений, при котором оценка признаков производится последовательно вплоть до момента, когда решение становится возможным. Статистический анализ такого подхода требует учета цены измерения признаков и цен получаемых ошибок и составляет предмет теории последовательного анализа (Вальд, 1947; Фу, 1968). Слейгл и Ли (1971) показали, как к задачам такого вида применять методы, разработанные для исследования деревьев в теории игр.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Абенд (Abend K.)
Compound decision procedures for pattern recognition, *Proc. NEC*, **22**, 777—780 (1966).

Абенд (Abend K.)
Compound decision procedures for unknown distributions and for dependent states of nature, in Pattern Recognition, pp. 207—249, L. Kanal, ed. (Thompson Book Co., Washington, D. C., 1968).

Абенд, Харли и Кенал (Abend K., Harley T. J., Kanal L. N.)
Classification of binary random patterns, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-11**, 538—544 (October 1965).

Альбрехт и Вернер (Albrecht R., Werner W.)
Error analysis of a statistical decision method, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-10**, 34—38 (January 1964).

Андерсон (Anderson T. W.)
An Introduction to Multivariate Statistical Analysis (John Wiley, New York, 1958).

Андерсон и Бахадур (Anderson T. W., Bahadur R. R.)
Classification into two multivariate normal distributions with different covariance matrices, *Ann. Math. Stat.*, **33**, 422—431 (June 1962).

Блекуэлл и Гиршик (Blackwell D., Girschick M. A.)
Theory of Games and Statistical Decisions (John Wiley, New York, 1954). [Русский перевод: Теория игр и статистических решений, М., ИЛ, 1958.]

Вальд (Wald A.)
Contributions to the theory of statistical estimation and testing of hypotheses, *Ann. Math. Stat.*, **10**, 299—326 (1939).

Вальд (Wald A.)
Sequential Analysis (John Wiley, New York, 1947).

Вальд (Wald A.)
Statistical Decision Functions (John Wiley, New York, 1950).

Казмирчак и Штейнбух (Kazmierczak H., Steinbuch K.)
Adaptive systems in pattern recognition, *IEEE Trans. on Elec. Comp.*, **EC-12**, 822—835 (December 1963).

Купер (Cooper P. W.)
Hyperplanes, hyperspheres, and hyperquadrics as decision boundaries, in Computer and Information Sciences, pp. 111—138, J. T. Tou and R. H. Wilcox, eds. (Spartan, Washington, D. C., 1964).

Лейниотис и Парк (Lainiotis D. G., Park S. K.)
Probability of error bounds, *IEEE Trans. Sys. Man Cyb.*, **SMC-1**, 175—178 (April 1971).

Льюс и Райфа (Luce R. D., Raiffa H.)
Games and Decisions (John Wiley, New York, 1957). [Русский перевод: Игры и решения, М., ИЛ, 1961.]

Минский (Minsky M.)
Steps toward artificial intelligence, *Proc. IRE*, **49**, 8—30 (January 1961).

Мэрилл и Грин (Marill T., Green D. M.)
Statistical recognition functions and the design of pattern recognizers, *IRE Trans. Elec. Comp.*, **EC-9**, 472—477 (December 1960).

Нейман и Пирсон (Neyman J., Pearson E. S.)
On the use and interpretation of certain test criteria for purposes of statistical inference, *Biometrica*, **20A**, 175—240 (1928).

Нейман и Пирсон (Neyman J., Pearson E. S.)
On the problem of the most efficient tests of statistical hypotheses, *Phill. Trans. Royal Soc. London*, **231**, 289—337 (1933).

фон Нейман и Моргеништерн (von Neumann J., Morgenstern O.)
Theory of Games and Economic Behavior (Princeton University Press, Princeton N. J., First Edition, 1944). [Русский перевод: Теория игр и экономическое поведение, М., «Наука», 1970.]

Нильсон (Nilsson N. J.)
Learning Machines (McGraw-Hill, New York, 1965). [Русский перевод: Обучающиеся машины, М., «Мир», 1967.]

Равив (Raviv J.)
Decision making in Markov chains applied to the problem of pattern recognition, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-13**, 536—551 (October 1967).

Райзман и Эрих (Riseman E. M., Ehrich R. W.)
Contextual word recognition using binary digrams, *IEEE Trans. Comp.*, **C-20**, 397—403 (April 1971).

Слейгл и Ли (Slagle J. R., Lee R. C. T.)
Applications of game tree searching techniques to sequential pattern recognition, *Com. ACM*, **14**, 103—110 (February 1971).

Уиндер (Winder R. O.)
Threshold logic in artificial intelligence, Artificial Intelligence, *IEEE Special Publication*, **S-142**, 107—128 (January 1963).

Фергюсон (Ferguson T. S.)
Mathematical Statistics: A Decision Theoretic Approach (Academic Press, New York, 1967).

Фишер (Fisher R. A.)
The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Ann. Eugenics*, **7**, Part II, 179—188 (1936); also in Contributions to Mathematical Statistics (John Wiley, New York, 1950).

Фу (Fu K. S.)
Sequential Methods in Pattern Recognition and Machine Learning (Academic Press, New York, 1968).

Ча и Чуи (Chu J. T., Chueh J. C.)
Error probability in decision functions for character recognition, *J. ACM*, **14**, 273—280 (April 1967).

Чернов и Мозес (Chernoff H., Moses L. E.)
Elementary Decision Theory (John Wiley, New York, 1959).

Чоу (Chow C. K.)
An optimum character recognition system using decision functions, *IRE Trans. on Elec. Comp.*, **EC-6**, 247—254 (December 1957).

Чоу (Chow C. K.)
Statistical independence and threshold functions, *IEEE Trans. on Com.*, **EC-14**, 66—68 (February 1965).
Чоу (Chow C. K.)
On optimum recognition error and reject tradeoff, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-16**, 41—46 (January 1970).

Задачи

1. Пусть условные плотности для одномерной задачи и двух классов заданы распределением Коши:

$$p(x \mid \omega_i) = \frac{1}{\pi b} \cdot \frac{1}{1+\left(\frac{x-a_i}{b}\right)^2}, \quad i=1, 2.$$

Считая, что $P(\omega_1)=P(\omega_2)$, покажите, что $P(\omega_1|x)=P(\omega_2|x)$ при $x=(1/2)(a_1+a_2)$.

Набросайте график $P(\omega_1|x)$ для случая $a_1=3$, $a_2=5$, $b=1$. Как ведет себя $P(\omega_1|x)$ при $x \to -\infty ? +\infty$?

2. Используя условные плотности из задачи 1 и полагая априорные вероятности равными, покажите, что минимальная вероятность ошибки определяется выражением

$$P(\text{ошибка}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \operatorname{ctg} \left| \frac{a_2-a_1}{2b} \right|.$$

Рассмотрите это выражение как функцию величины $|(a_2-a_1)/b|$.

3. Рассмотрите следующее решающее правило для одномерной задачи и двух классов: принимать решение ω_1 в случае, если $x>\theta$; в противном случае принимать решение ω_2. Покажите, что при использовании этого правила вероятность ошибки определяется выражением

$$P(\text{ошибка}) = P(\omega_1) \int_{-\infty}^{\theta} p(x \mid \omega_1)\, dx + P(\omega_2) \int_{\theta}^{\infty} p(x \mid \omega_2)\, dx.$$

Покажите посредством дифференцирования, что для получения наименьшего значения P (ошибка) необходимо, чтобы величина θ удовлетворяла выражению

$$p(\theta \mid \omega_1) P(\omega_1) = p(\theta \mid \omega_2) P(\omega_2).$$

Проверьте, однозначно ли определяется этим выражением величина θ. Приведите пример, когда величина θ, удовлетворяющая данному уравнению, на самом деле соответствует максимальной вероятности ошибки.

4. Пусть $\omega_{\max}(\mathbf{x})$ есть состояние природы, для которого $P(\omega_{\max}|\mathbf{x}) \geqslant P(\omega_i|\mathbf{x})$ для любого i, $i=1, \ldots, c$. Покажите, что $P(\omega_{\max}|\mathbf{x}) \geqslant 1/c$.

Покажите также, что в случае принятия решения по правилу минимального уровня ошибки средняя вероятность ошибки определяется выражением

$$P(\text{ошибка}) = 1 - \int P(\omega_{\max} \mid \mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}.$$

На основании полученных результатов покажите, что P (ошибка) $< (c-1)/c$. Опишите случай, при котором P (ошибка) $= (c-1)/c$.

5. Для неотрицательных чисел a и b покажите, что $\min(a, b) \leqslant \sqrt{ab}$. На основании этого покажите, что для байесовского классификатора на два класса уровень ошибки должен удовлетворять требованию

$$P(\text{ошибка}) \leqslant \sqrt{P(\omega_1) P(\omega_2)}\, \rho \leqslant \frac{1}{2} \rho,$$

где ρ — так называемый *коэффициент Бхаттачария*, равный

$$\rho = \int [p(\mathbf{x} \mid \omega_1)\, p(\mathbf{x} \mid \omega_2)]^{1/2}\, d\mathbf{x}.$$

6. Во многих задачах классификации образов допускается выбор: или отнести данный образ к одному из c классов, или *отказаться* принять решение. Такой отказ вполне допустим, если он не обходится слишком дорого. Пусть

$$\lambda(\alpha_i \mid \omega_j) = \begin{cases} 0, & i = j; \quad i, j = 1, \ldots, c, \\ \lambda_r, & i = c+1, \\ \lambda_s & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

где λ_r — потери, возникающие из-за выбора $(c+1)$-го действия, состоявшего в отказе от принятия решения, а λ_s — потери из-за ошибки, связанной с подменой класса. Покажите, что минимальный риск достигается, если принять решение ω_i в случае $P(\omega_i|\mathbf{x}) \geqslant P(\omega_j|\mathbf{x})$ для всех j и в случае $P(\omega_i|\mathbf{x}) \geqslant 1 - \lambda_r/\lambda_s$, с отбрасыванием прочих решений. Что произойдет в случае $\lambda_r = 0$? Что произойдет в случае $\lambda_r > \lambda_s$?

7. Пользуясь результатами, полученными при решении задачи 6, покажите, что следующие разделяющие функции оптимальны:

$$g_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} p(\mathbf{x} \mid \omega_i)\, P(\omega_i), & i = 1, \ldots, c, \\ \dfrac{\lambda_s - \lambda_r}{\lambda_s} \displaystyle\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x} \mid \omega_j)\, P(\omega_j), & i = c+1. \end{cases}$$

Изобразите эти разделяющие функции и области решений для одномерного случая и двух классов при $p(x|\omega_1) \sim N(1, 1)$, $p(x|\omega_2) \sim N(-1, 1)$, $P(\omega_1) = P(\omega_2) = 1/2$ и $\lambda_r/\lambda_s = 1/4$. Опишите качественно, что произойдет при возрастании λ_r/λ_s от 0 до 1.

8. Предположим, что детерминированную решающую функцию $\alpha(\mathbf{x})$ мы заменим *рандоминизированным правилом*, т. е. вероятностью $P(\alpha_i|\mathbf{x})$ принятия действия α_i при наблюдаемом значении $\mathbf{x}$. Покажите, что риск в этом случае определяется выражением

$$R = \int \left[\sum_{i=1}^{a} R(\alpha_i|\,\mathbf{x})\, P(\alpha_i|\,\mathbf{x}) \right] p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}.$$

Покажите, кроме того, что R можно минимизировать, выбирая $P(\alpha_i|\mathbf{x}) = 1$ для действия α_i, связанного с наименьшим условным риском $R(\alpha_i|\mathbf{x})$, т. е. что рандомизация в данном случае никакой выгоды не дает.

9. Рассмотрим многомерную нормальную плотность, для которой $\sigma_{ij} = 0$, а $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$. Покажите, что

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\prod_{i=1}^{d} \sqrt{2\pi}\, \sigma_i} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i} \right)^2 \right].$$

Опишите контуры постоянной плотности; запишите выражение для махаланобисова расстояния от $\mathbf{x}$ до $\boldsymbol{\mu}$.

10. Пусть $p(x|\omega_i) \sim N(\mu_i, \sigma^2)$ для одномерной задачи и двух классов при $P(\omega_1)=P(\omega_2)=1/2$. Покажите, что минимальная вероятность ошибки определяется выражением

$$P_e = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^\infty e^{-(1/2)u^2}\, du,$$

где $a=|\mu_2-\mu_1|/2\sigma$. Рассмотрите неравенство

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^\infty e^{-(1/2)t^2}\, dt \leqslant \frac{1}{\sqrt{2\pi}a} e^{-(1/2)a^2}.$$

Покажите, что P_e стремится к нулю при стремлении $|\mu_2-\mu_1|/\sigma$ к бесконечности.

11. Пусть $p(\mathbf{x}|\omega_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \sigma^2 I)$ для d-мерной задачи и двух классов при $P(\omega_1)=P(\omega_2)=1/2$. Покажите, что минимальная вероятность ошибки определяется выражением

$$P_e = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^\infty e^{-(1/2)u^2}\, du,$$

где $a=\|\boldsymbol{\mu}_2-\boldsymbol{\mu}_1\|/2\sigma$. Пусть $\boldsymbol{\mu}_1=0$ и $\boldsymbol{\mu}_2=(\mu, \ldots, \mu)^t$. Используя неравенство из задачи 10, покажите, что P_e стремится к нулю при стремлении d к бесконечности. Выразите смысл этого результата словами.

12. Пусть $p(\mathbf{x}|\omega_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma)$ для d-мерной задачи и двух классов с произвольными априорными вероятностями; рассмотрим махаланобисово расстояние

$$r_i^2 = (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma^{-1} (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i).$$

а) Покажите, что градиент величины r_i^2 определяется выражением

$$\nabla r_i^2 = 2\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i).$$

б) Покажите, что ∇r_i^2 указывает одно и то же направление вдоль любой прямой, проходящей через $\boldsymbol{\mu}_i$.

в) Покажите, что ∇r_1^2 и ∇r_2^2 указывают противоположные направлении вдоль прямой, соединяющей $\boldsymbol{\mu}_1$ и $\boldsymbol{\mu}_2$.

г) Покажите, что оптимальная разделяющая гиперплоскость касательна к гиперэллипсоидам постоянной плотности распределения в точке пересечения разделяющей гиперплоскости с прямой, проходящей через $\boldsymbol{\mu}_1$ и $\boldsymbol{\mu}_2$.

13. В предположении, что $\lambda_{21}>\lambda_{11}$ и $\lambda_{12}>\lambda_{22}$, покажите, что в общем случае разделяющая функция, дающая минимум риска для независимого бинарного случая, описанного в разд. 2.10, определяется выражением $g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t\mathbf{x}+w_0$, где $\mathbf{w}$ неизменна, а w_0 есть

$$w_0 = \sum_{i=1}^{d} \log \frac{1-p_i}{1-q_i} + \log \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)} + \log \frac{\lambda_{21}-\lambda_{11}}{\lambda_{12}-\lambda_{22}}.$$

14. Пусть компоненты вектора $\mathbf{x}=(x_1, \ldots, x_d)^t$ бинарны (1 или 0). Пусть также $P(\omega_j)$ есть априорная вероятность состояния природы $\omega_j (j=1, \ldots, c)$, и пусть

$$p_{ij} = \Pr(x_i = 1 \mid \omega_j), \quad i=1, \ldots, d, \; j=1, \ldots, c,$$

с компонентами x_i, статистически независимыми для всех $\mathbf{x}$ в ω_j.

Покажите, что минимальная вероятность ошибки получается при использовании следующего решающего правила: принять решение ω_k, если $g_k(\mathbf{x}) \geqslant g_j(\mathbf{x})$ для всех j, где

$$g_j(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} x_i \log \frac{p_{ij}}{1-p_{ij}} + \sum_{i=1}^{d} \log (1-p_{ij}) + \log P(\omega_j).$$

15. Пусть компоненты вектора $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_d)^t$ тернарны (1, 0 или -1) с вероятностями

$$p_{ij} = \Pr(x_i = 1 \mid \omega_j),$$
$$q_{ij} = \Pr(x_i = 0 \mid \omega_j),$$
$$r_{ij} = \Pr(x_i = -1 \mid \omega_j),$$

причем компоненты x_i статистически независимы для всех $\mathbf{x}$ в ω_j.

Покажите, что можно получить решающее правило с минимальной вероятностью ошибки, используя разделяющие функции $g_j(\mathbf{x})$, представляющие собой квадратичные функции компонент x_i. Попробуйте обобщить результаты решения задач 14 и 15.

16. Пусть $\mathbf{x}$ распределен так же, как в задаче 14, $c=2$, а d нечетно, пусть также

$$p_{i1} = p > 1/2, \quad i = 1, \ldots, d,$$
$$p_{i2} = 1-p, \quad i = 1, \ldots, d,$$

и

$$P(\omega_1) = P(\omega_2) = 1/2.$$

а) Покажите, что решающее правило по минимуму уровня ошибки при этом имеет вид

$$\text{принять решение } \omega_1, \text{ если } \sum_{i=1}^{d} x_i > d/2.$$

б) Покажите, что минимальная вероятность ошибки определяется выражением

$$P_e(d, p) = \sum_{k=0}^{(d-1)/2} \binom{d}{k} p^k (1-p)^{d-k}.$$

в) Чему равен предел $P_e(d, p)$ при $p \to 1/2$?

г) Покажите, что $P_e(d, p)$ стремится к нулю при $d \to \infty$. (Это трудно выполнить без привлечения закона больших чисел. Вместе с тем важно почувствовать, почему это соотношение верно, и для тех, кто этим интересуется, но не располагает временем для самостоятельного вывода, мы рекомендуем книгу В. Феллера «Введение в теорию вероятностей и ее приложения» (М., «Мир», 1967, т. I).

Глава 3

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ И ОБУЧЕНИЕ С УЧИТЕЛЕМ

3.1. ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ И ОБУЧЕНИЕ С УЧИТЕЛЕМ

В гл. 2 рассматривались вопросы разработки оптимального классификатора в случае, когда известны априорные вероятности $P(\omega_j)$ и плотности $p(\mathbf{x}|\omega_j)$, условные по классу. К сожалению, на практике при распознавании образов полная вероятностная структура задачи в указанном смысле известна далеко не всегда. В типичном случае имеется лишь неопределенное общее представление об исследуемой ситуации и некоторый набор *конструктивных выборок* — конкретных представителей образов, подлежащих классификации [1]). Задача, следовательно, заключается в том, чтобы найти способ построения классификатора, используя эту информацию.

Один из подходов к задаче заключается в ориентировочной оценке неизвестных вероятностей и плотностей по выборкам и последующем использовании полученных оценок, как если бы они были истинными значениями. Оценка априорных вероятностей в типичных задачах классификации образов не представляет большой трудности. Иначе обстоит дело с вопросом оценки условных по классу плотностей. Имеющееся количество выборок всегда представляется слишком малым для их оценки, и если размерность вектора признаков $\mathbf{x}$ велика, то задача сильно усложняется. Трудность значительно уменьшится, если возможна параметризация условных плотностей, исходя из общего представления о задаче. Допустим, например, что есть некоторые основания предположить, что $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ соответствует нормальному распределению со средним значением $\boldsymbol{\mu}_j$ и ковариационной матрицей $\boldsymbol{\Sigma}_j$, хотя точные значения указанных величин неизвестны. Это упрощает задачу, сводя ее вместо определения *функции* $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ к оценке *параметров* $\boldsymbol{\mu}_j$ и $\boldsymbol{\Sigma}_j$.

Задача оценки параметров, относящаяся к классическим задачам математической статистики, может быть решена различными способами. Мы рассмотрим два общепринятых способа — *оценку по максимуму правдоподобия* и *байесовскую оценку*. Несмотря на

---

[1]) В литературе по математической статистике выборка объема n соответствует набору n таких представителей. Считая каждый из представителей выборкой, мы следуем практике, принятой в технической литературе. Статистикам следовало бы каждую из рассматриваемых здесь выборок считать выборкой единичного объема.

то что результаты часто оказываются весьма близкими, подход к решению при применении этих способов принципиально различен. При использовании методов максимального правдоподобия значения параметров предполагаются фиксированными, но неизвестными. Наилучшая оценка определяется как величина, при которой вероятность реально наблюдаемых выборок максимальна. При байесовских методах параметры рассматриваются как случайные переменные с некоторым априорно заданным распределением. Исходя из результатов наблюдений выборок, это распределение преобразуют в апостериорную плотность, используемую для уточнения имеющегося представления об истинных значениях параметров.

Как мы увидим, в байесовском случае характерным следствием привлечения добавочных выборок является заострение формы функции апостериорной плотности, подъем ее вблизи истинных значений параметров. Это явление принято называть *байесовским обучением*. Следует различать *обучение с учителем* и *обучение без учителя*. Предполагается, что в обоих случаях выборки $\mathbf{x}$ получаются посредством выбора состояния природы ω_j с вероятностью $P(\omega_j)$, а затем независимого выбора $\mathbf{x}$ в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\omega_j)$. Различие состоит в том, что при обучении с учителем известно состояние природы (индекс класса) для каждого значения, тогда как при обучении без учителя оно неизвестно. Как и следовало ожидать, задача обучения без учителя значительно сложнее. В данной главе будет рассмотрен только случай обучения с учителем, рассмотрение же случая обучения без учителя отложим до гл. 6.

3.2. ОЦЕНКА ПО МАКСИМУМУ ПРАВДОПОДОБИЯ

3.2.1. ОБЩАЯ ИДЕЯ МЕТОДА

Предположим, что мы разбили множество выборок на классы, так что получено c классов выборок $\mathcal{X}_1, \ldots, \mathcal{X}_c$, причем выборки в каждом классе $\mathcal{X}_j$ получены независимо в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\omega_j)$. Предполагается, что плотность $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ задана в известной параметрической форме и, следовательно, однозначно определяется вектором параметров $\boldsymbol{\theta}_j$. Мы могли, например, получить распределение $p(\mathbf{x}|\omega_j) \sim N(\boldsymbol{\mu}_j, \Sigma_j)$, в котором компоненты $\boldsymbol{\theta}_j$ составлены из компонент $\boldsymbol{\mu}_j$ и Σ_j. Чтобы явно выразить зависимость $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ от $\boldsymbol{\theta}_j$, запишем $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ в виде [1]) $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j)$. Задача состоит в использовании информации, получаемой из выборок, для удовлетворительной оценки векторов параметров $\boldsymbol{\theta}_1, \ldots, \boldsymbol{\theta}_c$.

[1]) Некоторые авторы предпочитают запись вида $p(\mathbf{x}|\omega_j; \boldsymbol{\theta}_j)$, так как, строго говоря, обозначение $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j)$ подразумевает, что $\boldsymbol{\theta}_j$ есть случайная переменная. Мы пренебрежем этим различием в обозначениях и будем считать $\boldsymbol{\theta}_j$ обычным параметром при анализе по максимуму правдоподобия и случайной переменной при байесовском анализе.

Для облегчения задачи предположим, что выборки, принадлежащие $\mathcal{X}_i$, не содержат информации о θ_j, если $i \neq j$, т. е. предполагается функциональная независимость параметров, принадлежащих разным классам [1]). Это дает возможность иметь дело с каждым классом в отдельности и упростить обозначения, исключив индексы принадлежности классу. В результате получается c отдельных задач, формулируемых следующим образом: на основании множества $\mathcal{X}$ независимо полученных выборок в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\theta)$ оценить неизвестный параметрический вектор θ.

Предположим, что $\mathcal{X}$ содержит n выборок: $\mathcal{X}=\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$. Так как выборки получены независимо, имеем

$$p(\mathcal{X}|\theta) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k|\theta). \quad (1)$$

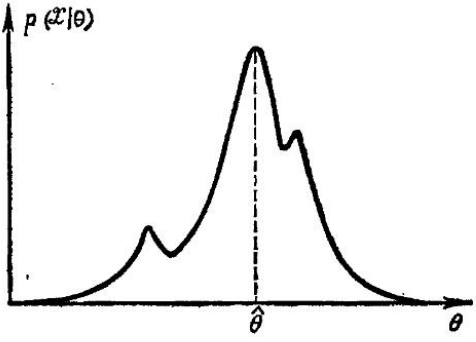


Рис. 3.1. Оценка по максимуму правдоподобия для параметра θ.

Рассматриваемая как функция от θ, плотность $p(\mathcal{X}|\theta)$ называется *правдоподобием* величины θ относительно данного множества выборок. *Оценка по максимуму правдоподобия* величины θ есть по определению такая величина $\hat{\theta}$, при которой плотность $p(\mathcal{X}|\theta)$ максимальна (рис. 3.1).

Интуитивно это означает, что в некотором смысле такое значение величины θ наилучшим образом соответствует реально наблюдаемым выборкам.

Для целей анализа обычно удобнее иметь дело с логарифмом правдоподобия, нежели с самой его величиной. Так как логарифм есть монотонно возрастающая функция, то максимуму логарифма правдоподобия и максимуму правдоподобия соответствует одна и та же величина $\hat{\theta}$. Если $p(\mathcal{X}|\theta)$ есть гладкая дифференцируемая функция θ, то $\hat{\theta}$ определяется посредством обычных методов дифференциального исчисления. Пусть θ есть p-компонентный вектор $\theta=(\theta_1, \ldots, \theta_p)^t$, пусть также ∇_θ — оператор градиента,

$$\nabla_\theta = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial\theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial\theta_p} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

[1]) Иногда это и не имеет места, например когда все выборки входят в одну и ту же ковариационную матрицу. Что следует делать в таких случаях, показано в задаче 6.

и пусть $l(\theta)$ — фуикция логарифма правдоподобия

$$l(\theta) = \log p(\mathcal{X} \mid \theta). \tag{3}$$

Тогда

$$l(\theta) = \sum_{k=1}^{n} \log p(\mathbf{x}_k \mid \theta) \tag{4}$$

и

$$\nabla_\theta l = \sum_{k=1}^{n} \nabla_\theta \log p(\mathbf{x}_k \mid \theta). \tag{5}$$

Совокупность условий, необходимых для определения оценки по максимуму правдоподобия величины θ, может быть получена, таким образом, из решения системы p уравнений $\nabla_\theta l = 0$.

3.2.2. СЛУЧАЙ МНОГОМЕРНОГО НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ: НЕИЗВЕСТНО СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ

Для иллюстрации применения полученных результатов к конкретному случаю предположим, что выборки производятся из нормально распределенной совокупности со средним значением μ и ковариационной матрицей Σ. Для простоты сначала рассмотрим случай, когда неизвестно только среднее значение. Тогда

$$\log p(\mathbf{x}_k \mid \mu) = -\frac{1}{2} \log \{(2\pi)^d |\Sigma|\} - \frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \mu)^t \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_k - \mu)$$

и

$$\nabla_\mu \log p(\mathbf{x}_k \mid \mu) = \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_k - \mu).$$

Если отождествить θ и μ, то из уравнения (5) увидим, что оценка по максимуму правдоподобия для μ должна удовлетворять уравнению

$$\sum_{k=1}^{n} \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_k - \hat{\mu}) = 0.$$

После умножения на Σ и преобразования получим

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k. \tag{6}$$

Этот результат весьма убедителен. Он свидетельствует о том, что оценка по максимуму правдоподобия при неизвестном среднем по совокупности в точности равна среднему арифметическому выборок — *выборочному среднему*. Если представить n выборок геометрически в виде облака точек, то выборочное среднее будет центром этого облака. Помимо всего, выборочное среднее имеет ряд достоинств с точки зрения статистических свойств, в связи с чем эта

весьма наглядная оценка часто оказывается предпочтительнее, не говоря уже о том, что она представляет максимально правдоподобное решение.

3.2.3. ОБЩИЙ МНОГОМЕРНЫЙ НОРМАЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ

В общем и более типичном многомерном нормальном случае неизвестны как среднее μ, так и ковариационная матрица Σ. Как раз эти неизвестные параметры и образуют компоненты параметрического вектора θ. Рассмотрим одномерный случай, приняв $\theta_1=\mu$ и $\theta_2=\sigma^2$. Здесь имеем

$$\log p(x_k|\theta) = -\frac{1}{2}\log 2\pi\theta_2 - \frac{1}{2\theta_2}(x_k-\theta_1)^2$$

и

$$\nabla_\theta \log p(x_k|\theta) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta_2}(x_k-\theta_1) \\ -\frac{1}{2\theta_2}+\frac{(x_k-\theta_1)^2}{2\theta_2^2} \end{bmatrix}.$$

Тогда уравнение (5) приводит к следующим условиям:

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{\hat{\theta}_2}(x_k-\hat{\theta}_1)=0$$

и

$$-\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{\hat{\theta}_2}+\sum_{k=1}^{n}\frac{(x_k-\hat{\theta}_1)^2}{\hat{\theta}_2^2}=0,$$

где $\hat{\theta}_1$ и $\hat{\theta}_2$ — оценки по максимуму правдоподобия соответственно для θ_1 и θ_2. После подстановки $\hat{\mu}=\hat{\theta}_1$, $\hat{\sigma}^2=\hat{\theta}_2$ и несложных преобразований получим следующие оценки по максимуму правдоподобия для μ и σ^2:

$$\hat{\mu}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k, \tag{7}$$

$$\hat{\sigma}^2=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(x_k-\hat{\mu})^2. \tag{8}$$

Хотя анализ многомерного случая в основном носит аналогичный характер, он значительно более трудоемок. Из литературы [1]) хорошо известно, что оценка по максимуму правдоподобия для μ

[1]) Т. Андерсон, Введение в многомерный статистический анализ, гл. 3, М., Физматгиз, 1963.

и Σ дается выражениями

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k \tag{9}$$

и

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} (\mathbf{x}_k - \hat{\mu})(\mathbf{x}_k - \hat{\mu})^t. \tag{10}$$

Таким образом, еще раз подтверждается, что оценка по максимуму правдоподобия для среднего значения вектора — это выборочное среднее. Оценка по максимуму правдоподобия для ковариационной матрицы — это среднее арифметическое n матриц $(\mathbf{x}_k - \hat{\mu})(\mathbf{x}_k - \hat{\mu})^t$. Так как подлинная ковариационная матрица и есть ожидаемое значение матрицы $(\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)^t$, то полученный результат также весьма естествен.

3.3. БАЙЕСОВСКИЙ КЛАССИФИКАТОР

Читателям, знакомым с математической статистикой, известно, что оценка по максимуму правдоподобия для ковариационной матрицы смещена, т. е. ожидаемое значение $\hat{\Sigma}$ не равно Σ. Несмещенная оценка для Σ задается *выборочной ковариационной матрицей*

$$C = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n} (\mathbf{x}_k - \hat{\mu})(\mathbf{x}_k - \hat{\mu})^t. \tag{11}$$

Очевидно, что $\hat{\Sigma} = [(n-1)/n]C$, так что эти две оценки, по существу, совпадают при большом n. Однако наличие двух сходных и тем не менее разных оценок для ковариационной матрицы смущает многих исследователей, так как, естественно, возникает вопрос: какая же из них «верная»? Ответить на это можно, сказав, что каждая из этих оценок ни верна, ни ложна: они просто различны. Наличие двух различных оценок на деле показывает, что единой оценки, включающей все свойства, которые только можно пожелать, не существует. Для наших целей сформулировать наиболее желательные свойства довольно сложно — нам нужна такая оценка, которая позволила бы наилучшим образом проводить классификацию. Хотя разрабатывать классификатор, используя оценки по максимуму правдоподобия для неизвестных параметров, обычно представляется разумным и логичным, вполне естествен вопрос, а нет ли других оценок, обеспечивающих еще лучшее качество работы. В данном разделе мы рассмотрим этот вопрос с байесовской точки зрения.

3.3.1. ПЛОТНОСТИ, УСЛОВНЫЕ ПО КЛАССУ

Сущность байесовской классификации заложена в расчете апостериорных вероятностей $P(\omega_i|\mathbf{x})$. Байесовское правило позволяет вычислять эти вероятности по априорным вероятностям $P(\omega_i)$ и условным по классу плотностям $p(\mathbf{x}|\omega_i)$, однако возникает вопрос: как быть, если эти величины неизвестны? Общий ответ таков: лучшее, что мы можем сделать,— это вычислить $P(\omega_i|\mathbf{x})$, используя всю информацию, имеющуюся в распоряжении. Часть этой информации может быть априорной, как, например, знание о виде неизвестных функций плотности и диапазонах значений неизвестных параметров. Часть этой информации может содержаться в множестве выборок. Пусть $\mathcal{X}$ обозначает множество выборок, тогда мы подчеркнем роль выборок, сказав, что цель заключается в вычислении апостериорных вероятностей $P(\omega_i|\mathbf{x},\mathcal{X})$. По этим вероятностям мы можем построить байесовский классификатор.

Согласно байесовскому правилу [1]),

$$P(\omega_i|\mathbf{x},\mathcal{X}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i,\mathcal{X})P(\omega_i|\mathcal{X})}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j,\mathcal{X})P(\omega_j|\mathcal{X})}. \tag{12}$$

Это уравнение означает, что мы можем использовать информацию, получаемую из выборок, для определения как условных по классу плотностей, так и априорных вероятностей.

Мы могли бы придерживаться этой общности, однако впредь будем предполагать, что истинные значения априорных вероятностей известны, так что $P(\omega_i|\mathcal{X})=P(\omega_i)$. Кроме того, так как в данном случае мы имеем дело с наблюдаемыми значениями, то можно разделить выборки по классам в c подмиожеств $\mathcal{X}_1, \ldots, \mathcal{X}_c$, причем выборки из $\mathcal{X}_i$ принадлежат ω_i. Во многих случаях, в частности во всех, с которыми мы будем иметь дело, выборки из $\mathcal{X}_j$ не оказывают влияния на $p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X})$, если $i\neq j$. Отсюда вытекают два упрощающих анализа следствия. Во-первых, это позволяет нам иметь дело с каждым классом в отдельности, используя для определения $p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X})$ только выборки из $\mathcal{X}_i$. Вместе с принятым нами предположением, что априорные вероятности известны, это следствие позволяет записать уравнение (12) в виде

$$p(\omega_i|\mathbf{x}, \mathcal{X}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}_i)P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \mathcal{X}_j)P(\omega_j)}. \tag{13}$$

[1]) Заметим, что в данном уравнении каждая вероятность и функция плотности условны по отношению к миожеству выборок. То обстоятельство, что данное уравнение и есть просто байесовское правило, становится более ясным, если опустить общие величины, входящие в виде условий. Читатель может найти этот прием полезным при интерпретации сходных уравнений в других местах данной главы.

Во-вторых, так как каждый класс может рассматриваться независимо, можно отказаться от ненужных различий классов и упростить записи. По существу, здесь имеется c отдельных задач следующего вида: требуется определить $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$, используя множество $\mathcal{X}$ выборок, взятых независимо в соответствии с фиксированным, но неизвестным вероятностным законом $p(\mathbf{x})$. Это и составляет главную задачу байесовского обучения.

3.3.2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ

Хотя требуемая плотность $p(\mathbf{x})$ неизвестна, предположим, что она имеет известную параметрическую форму. Единственно, что предполагается неизвестным, это величина параметрического вектора $\boldsymbol{\theta}$. Тот факт, что $p(\mathbf{x})$ неизвестна, но имеет известный параметрический вид, выразим утверждением, что функция $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ полностью известна. При байесовском подходе предполагается, что неизвестный параметрический вектор есть случайная переменная. Всю информацию о $\boldsymbol{\theta}$ до наблюдения выборок дает *известная* априорная плотность $p(\boldsymbol{\theta})$. Наблюдение выборок превращает ее в апостериорную плотность $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$, которая, как можно надеяться, имеет крутой подъем вблизи истинного значения $\boldsymbol{\theta}$.

Основная наша цель — это вычисление плотности $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$, достаточно достоверной для того, чтобы прийти к получению неизвестной $p(\mathbf{x})$. Это вычисление мы выполняем посредством интегрирования объединенной плотности $p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$ по $\boldsymbol{\theta}$. Получаем

$$p(\mathbf{x}\,|\,\mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x},\ \boldsymbol{\theta}\,|\,\mathcal{X})\,d\boldsymbol{\theta},$$

причем интегрирование производится по всему пространству параметра [1]). Теперь $p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$ всегда можно представить как произведение $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{X})p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$. Так как $\mathbf{x}$ и выборки из $\mathcal{X}$ получаются независимо, то первый множитель есть просто $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$. Распределение величины $\mathbf{x}$, таким образом, полностью известно, если известна величина параметрического вектора. В результате имеем

$$p(\mathbf{x}\,|\,\mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x}\,|\,\boldsymbol{\theta})\,p(\boldsymbol{\theta}\,|\,\mathcal{X})\,d\boldsymbol{\theta}. \tag{14}$$

Это важнейшее уравнение связывает «условную по классу» плотность $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ с апостериорной плотностью $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$ неизвестного параметрического вектора. Если вблизи некоторого значения $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ функция $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$ имеет острый пик, то $p(\mathbf{x}|\mathcal{X}) \approx p(\mathbf{x}|\hat{\boldsymbol{\theta}})$, так что решение может быть получено подстановкой оценки $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ в качестве истинной величины вектора параметров. Вообще, если существует большая

[1]) На протяжении данной главы областью интегрирования для всех интегралов будет все упомянутое пространство.

неопределенность относительно точного значения θ, это уравнение приводит к средней плотности $p(\mathbf{x}|\theta)$ по возможным значениям θ. Таким образом, в случае, когда неизвестные плотности имеют известный параметрический вид, выборки влияют на $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ через апостериорную плотность $p(\theta|\mathcal{X})$.

3.4. ОБУЧЕНИЕ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ СРЕДНЕГО ЗНАЧЕНИЯ НОРМАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ

3.4.1. СЛУЧАЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ: $p(\mu|\mathcal{X})$

В данном разделе мы рассмотрим вычисление апостериорной плотности $p(\theta|\mathcal{X})$ и требуемой плотности $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ для случая, когда $p(\mathbf{x}|\mu) \sim N(\mu, \Sigma)$, а вектор среднего значения μ есть неизвестный вектор параметров. Для простоты начнем с одномерного случая, при котором

$$p(x|\mu) \sim N(\mu, \sigma^2), \tag{15}$$

где единственной неизвестной величиной является среднее значение μ. Предположим, что любое исходное знание, которое мы можем иметь о μ, можно выразить посредством *известной* априорной плотности $p(\mu)$. Кроме того, можно предположить, что

$$p(\mu) \sim N(\mu_0, \sigma_0^2), \tag{16}$$

где μ_0 и σ_0^2 известны. Грубо говоря, величина μ_0 есть наше лучшее исходное предположение относительно μ, а σ_0^2 отражает неуверенность в отношении этого предположения. Предположение о том, что априорное распределение для μ нормальное, в дальнейшем упростит математические выражения. Однако решающее предположение заключается не столько в том, что априорное распределение μ нормально, сколько в том, что оно существует и известно.

Выбрав априорную плотность для μ, можно представить ситуацию следующим образом. Вообразим, что величина μ получена из множества, подчиняющегося вероятностному закону $p(\mu)$. Будучи однажды получена, эта величина представляет истинное значение μ и полностью определяет плотность для x. Предположим теперь, что из полученного множества независимо взято n выборок $x_1, \ldots, x_n$. Положив $\mathcal{X} = \{x_1, \ldots, x_n\}$, воспользуемся байесовским правилом, чтобы получить выражение

$$p(\mu|\mathcal{X}) = \frac{p(\mathcal{X}|\mu)\,p(\mu)}{\int p(\mathcal{X}|\mu)\,p(\mu)\,d\mu} = \alpha \prod_{k=1}^{n} p(x_k|\mu)\,p(\mu), \tag{17}$$

где α — масштабный множитель, зависящий от $\mathcal{X}$, но не зависящий от μ. Из этого уравнения видно, как наблюдение выборочного множества влияет на наше представление об истинном значении μ, «превращая» априорную плотность $p(\mu)$ в апостериорную плотность $p(\mu|\mathcal{X})$. Так как $p(x_k|\mu) \sim N(\mu, \sigma^2)$ и $p(\mu) \sim N(\mu_0, \sigma_0^2)$, то имеем

$$p(\mu|\mathcal{X}) = \alpha \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_k-\mu}{\sigma}\right)^2\right] \times$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-\mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right] =$$

$$= \alpha' \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\mu-x_k}{\sigma}\right)^2 + \left(\frac{\mu-\mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right\}\right] =$$

$$= \alpha'' \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{n}{\sigma^2}+\frac{1}{\sigma_0^2}\right)\mu^2 - 2\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{k=1}^{n} x_k + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}\right)\mu\right\}\right], \quad (18)$$

где множители, не зависящие от μ, включены в константы α' и α''. Таким образом, $p(\mu|\mathcal{X})$, представляющая собой экспоненциальную функцию квадратичной функции от μ, также является нормальной плотностью. Так как это остается в силе для любого числа выборок, то $p(\mu|\mathcal{X})$ остается нормальной, когда число n выборок возрастает, и $p(\mu|\mathcal{X})$ называют *воспроизводящей плотностью*. Если воспользоваться $p(\mu|\mathcal{X}) \sim N(\mu_n, \sigma_n^2)$, то значения μ_n и σ_n^2 могут быть найдены приравниванием коэффициентов из уравнения (18) соответствующим коэффициентам из выражения

$$p(\mu|\mathcal{X}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-\mu_n}{\sigma_n}\right)^2\right]. \quad (19)$$

Отсюда получаем

$$\frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2} \quad (20)$$

и

$$\frac{\mu_n}{\sigma_n^2} = \frac{n}{\sigma^2} m_n + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2}, \quad (21)$$

где m_n есть *выборочное среднее*

$$m_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k. \quad (22)$$

Решая уравнения в явном виде относительно μ_n и σ_n^2, получаем

$$\mu_n = \frac{n\sigma_0^2}{n\sigma_0^2+\sigma^2} m_n + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2+\sigma^2}\mu_0 \quad (23)$$

и

$$\sigma_n^2 = \frac{\sigma_0^2\sigma^2}{n\sigma_0^2+\sigma^2}. \quad (24)$$

Из этих уравнений видно, как комбинация априорной информации и эмпирической информации выборок дает апостериорную плотность $p(\mu|\mathcal{X})$. Грубо говоря, μ_n представляет наше лучшее предположение относительно μ после наблюдения n выборок, а σ_n^2 отражает нашу неуверенность относительно этого предположения. Так как σ_n^2 монотонно убывает с ростом n, стремясь к σ^2/n при стремлении n к бесконечности, каждое добавочное наблюдение уменьшает нашу

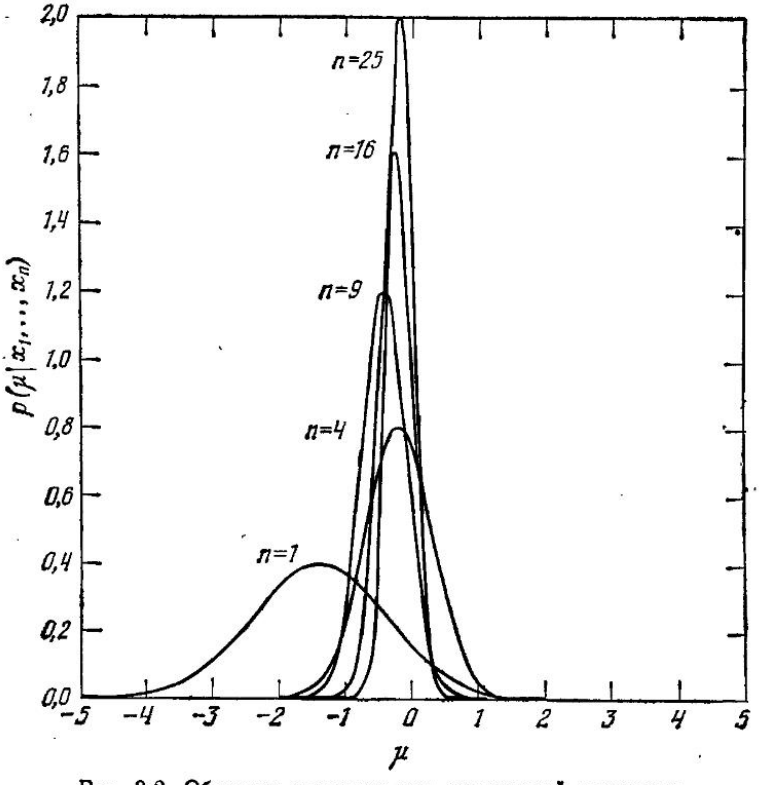


Рис. 3.2. Обучение среднему при нормальной плотности.

неуверенность относительно истинного значения μ. При возрастании n функция $p(\mu|\mathcal{X})$ все более заостряется, стремясь к дельта-функции при $n \to \infty$. Такое поведение обычно называется *байесовским обучением* (рис. 3.2).

Вообще μ_n представляет линейную комбинацию m_n и μ_0 с неотрицательными коэффициентами, сумма которых равна единице. Поэтому значение μ_n всегда лежит между m_n и μ_0. При $\sigma_0 \neq 0$ величина μ_n стремится к выборочному среднему при стремлении n к бесконечности. Если $\sigma_0 = 0$, то получаем вырожденный случай, при котором априорная уверенность в том, что $\mu = \mu_0$, настолько

тверда, что никакое число наблюдений не сможет изменить нашего мнения. При другой крайности, когда $\sigma_0 \gg \sigma$, мы настолько не уверены в априорном предположении, что принимаем $\mu_n = m_n$, исходя при оценке μ только из выборок. Вообще относительный баланс между исходным представлением и опытными данными определяется отношением σ^2 к σ_0^2, называемым иногда *догматизмом*. Если догматизм не бесконечен, то после получения достаточного числа выборок предполагаемые конкретные значения μ_0 и σ_0^2 не играют роли, а μ_n стремится к выборочному среднему.

3.4.2. СЛУЧАЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ: $p(x \mid \mathcal{X})$

После получения апостериорной плотности $p(\mu|\mathcal{X})$ остается только определить «условную по классу» плотность $p(x|\mathcal{X})$[1]). Из уравнений (14), (15) и (19) имеем

$$\begin{aligned} p(x \mid \mathcal{X}) &= \int p(x|\mu)\, p(\mu \mid \mathcal{X})\, d\mu = \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n} \times \\ &\quad \times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu-\mu_n}{\sigma_n}\right)^2\right] d\mu = \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma\sigma_n} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu_n)^2}{\sigma^2+\sigma_n^2}\right] f(\sigma, \sigma_n), \end{aligned}$$

где

$$f(\sigma, \sigma_n) = \int \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{\sigma^2+\sigma_n^2}{\sigma^2\sigma_n^2}\left(\mu - \frac{\sigma_n^2 x + \sigma^2\mu_n}{\sigma^2+\sigma_n^2}\right)^2\right] d\mu.$$

Следовательно, поскольку плотность $p(x|\mathcal{X})$ как функция x пропорциональна $\exp[-(1/2)(x-\mu_n)^2/(\sigma^2+\sigma^2_n)]$, то плотность $p(x|\mathcal{X})$ распределена нормально со средним μ_n и дисперсией $\sigma^2+\sigma_n^2$:

$$p(x \mid \mathcal{X}) \sim N(\mu_n, \sigma^2+\sigma_n^2). \tag{25}$$

Другими словами, для получения «условной по классу» плотности $p(x|\mathcal{X})$, имеющей параметрическую форму $p(x|\mu) \sim N(\mu, \sigma^2)$, следует просто заменить μ на μ_n и σ^2 на $\sigma^2+\sigma_n^2$. По сути дела, с условным средним μ_n обращаются так, как если бы оно было истинным средним, а увеличение дисперсии характеризует дополнительную неопределенность x из-за недостаточно точного представления о среднем значении μ. Это и является окончательным результатом: плотность $p(x|\mathcal{X})$ есть требуемая условная по классу плотность $p(x|\omega_j, \mathcal{X}_j)$, которая с априорными вероятностями $P(\omega_j)$ составляет вероятностную информацию, требуемую для построения байесовского классификатора.

---

[1]) Напомним, что для простоты мы не различаем классы, но все выборки здесь принадлежат одному и тому же классу, скажем ω_j, так что $p(x|\mathcal{X})$ на деле есть $p(x|\omega_j, \mathcal{X}_j)$.

3.4.3. СЛУЧАЙ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Исследовать случай многих переменных можно, непосредственно обобщив случай с одной переменной. Поэтому мы ограничимся лишь беглым наброском относящихся к нему доказательств. Как и прежде, положим, что

$$p(\mathbf{x}\,|\,\boldsymbol{\mu}) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma) \tag{26}$$

и

$$p(\boldsymbol{\mu}) \sim N(\boldsymbol{\mu}_0, \Sigma_0), \tag{27}$$

где Σ, Σ_0 и $\boldsymbol{\mu}_0$ предполагаются известными. После того как получено множество $\mathscr{X}$, содержащее n независимых выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, можно применить байесовское правило и получить выражение

$$p(\boldsymbol{\mu}\,|\,\mathscr{X}) = \alpha \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k\,|\,\boldsymbol{\mu})\, p(\boldsymbol{\mu}) =$$

$$= \alpha'' \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{\mu}^t (n\Sigma^{-1} + \Sigma_0^{-1})\,\boldsymbol{\mu} - 2\boldsymbol{\mu}^t\left(\Sigma^{-1}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k + \Sigma_0^{-1}\boldsymbol{\mu}_0\right)\right\}\right],$$

которое представим в виде

$$p(\boldsymbol{\mu}\,|\,\mathscr{X}) = \alpha''' \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{\mu}_n)^t \Sigma_n^{-1}(\boldsymbol{\mu}-\boldsymbol{\mu}_n)\right].$$

Таким образом, $p(\boldsymbol{\mu}|\mathscr{X}) \sim N(\boldsymbol{\mu}_n, \Sigma_n)$, и мы снова получили воспроизводящую плотность. Приравнивая коэффициенты, получим уравнения, аналогичные (20) и (21):

$$\Sigma_n^{-1} = n\Sigma^{-1} + \Sigma_0^{-1} \tag{28}$$

и

$$\Sigma_n^{-1}\boldsymbol{\mu}_n = n\Sigma^{-1}\mathbf{m}_n + \Sigma_0^{-1}\boldsymbol{\mu}_0, \tag{29}$$

где $\mathbf{m}_n$ есть выборочное среднее

$$\mathbf{m}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k. \tag{30}$$

Решение этих уравнений относительно $\boldsymbol{\mu}_n$ и Σ_n можно облегчить, если принять во внимание матричное тождество

$$(A^{-1} + B^{-1})^{-1} = A(A+B)^{-1}B = B(A+B)^{-1}A,$$

справедливое для двух любых невырожденных матриц A и B размера $d \times d$. После несложных преобразований приходим к окончательному результату:

$$\boldsymbol{\mu}_n = \Sigma_0\left(\Sigma_0 + \frac{1}{n}\Sigma\right)^{-1}\mathbf{m}_n + \frac{1}{n}\Sigma\left(\Sigma_0 + \frac{1}{n}\Sigma\right)^{-1}\boldsymbol{\mu}_0 \tag{31}$$

и

$$\Sigma_n = \Sigma_0\left(\Sigma_0 + \frac{1}{n}\Sigma\right)^{-1}\frac{1}{n}\Sigma. \tag{32}$$

Для доказательства того, что $p(\mathbf{x}|\mathcal{X}) \sim N(\boldsymbol{\mu}_n, \Sigma+\Sigma_n)$, надо, как и прежде, произвести интегрирование

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu})\, p(\boldsymbol{\mu}|\mathcal{X})\, d\boldsymbol{\mu}.$$

Вместе с тем к тому же результату можно прийти с меньшими затратами, если принять во внимание, что $\mathbf{x}$ можно рассматривать как сумму двух случайных переменных — случайного вектора $\boldsymbol{\mu}$, такого, что $p(\boldsymbol{\mu}|\mathcal{X}) \sim N(\boldsymbol{\mu}_n, \Sigma_n)$, и независимого случайного вектора $\mathbf{y}$, такого, что $p(\mathbf{y}) \sim N(0, \Sigma)$. В связи с тем что сумма двух независимых нормально распределенных векторов есть также нормально распределенный вектор со средним значением, равным сумме средних значений, и ковариационной матрицей, равной сумме ковариационных матриц, получим

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{X}) \sim N(\boldsymbol{\mu}_n, \Sigma+\Sigma_n), \tag{33}$$

что и завершает наше обобщение.

3.5. БАЙЕСОВСКОЕ ОБУЧЕНИЕ В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ

Только что мы видели, каким образом может использоваться байесовский подход для получения требуемой плотности $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ в конкретном случае многих нормально распределенных переменных. Этот подход можно распространить на любую ситуацию, при которой допускается параметризация неизвестной плотности. Основные допущения при этом следующие:

1). Вид плотности $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ предполагается известным, хотя точное значение параметрического вектора $\boldsymbol{\theta}$ неизвестно.

2). Предполагается, что наше исходное представление о величине $\boldsymbol{\theta}$ основано на известной априорной плотности $p(\boldsymbol{\theta})$.

3). Все прочие знания о $\boldsymbol{\theta}$ мы получаем из множества $\mathcal{X}$, содержащего n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, извлекаемых независимо в соответствии с неизвестным вероятностным законом $p(\mathbf{x})$.

Основная задача состоит в вычислении апостериорной плотности $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})$, так как, имея ее, можно посредством соотношения (14) вычислить $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$:

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})\, p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X})\, d\boldsymbol{\theta}. \tag{14}$$

Согласно байесовскому правилу, имеем

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{X}) = \frac{p(\mathcal{X}|\boldsymbol{\theta})\, p(\boldsymbol{\theta})}{\int p(\mathcal{X}|\boldsymbol{\theta})\, p(\boldsymbol{\theta})\, d\boldsymbol{\theta}}, \tag{34}$$

а в соответствии с предположением о независимости

$$p(\mathcal{X}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k|\boldsymbol{\theta}). \tag{35}$$

Нами получено формальное решение данной задачи. Как оно соотносится с решением по максимуму правдоподобия, видно из выражений (14) и (34). Предположим, что $p(\mathcal{X}|\theta)$ имеет острый пик при $\theta=\hat{\theta}$. Если априорная плотность $p(\theta)$ при $\theta=\hat{\theta}$ не равна нулю и не претерпевает больших изменений в окрестности этой точки, то $p(\theta|\mathcal{X})$ также имеет пик в этой точке. Из (14), таким образом, следует, что $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ будет примерно представлять $p(\mathbf{x}|\hat{\theta})$, и результат этот можно было бы получить, используя оценку по максимуму правдоподобия, как если бы она и была истинным значением. Если же пик $p(\mathcal{X}|\theta)$ не настолько остр, чтобы можно было пренебречь влиянием априорной информации или неопределенностью истинного значения величины θ, то способ использования имеющейся информации для расчета требуемой плотности $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ подсказывается байесовским решением.

Хотя нами получено формальное байесовское решение задачи, остается еще ряд интересных вопросов. Один из них относится к трудностям проведения указанных вычислений. Другой вопрос имеет отношение к сходимости $p(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ к $p(\mathbf{x})$. Сначала кратко обсудим вопрос сходимости, а позже вернемся к вопросу о вычислениях.

Для четкого обозначения числа выборок в множестве, используем запись вида $\mathcal{X}^n=\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$. Далее из соотношения (35) для $n>1$ получим

$$p(\mathcal{X}^n|\theta)=p(\mathbf{x}_n|\theta)\,p(\mathcal{X}^{n-1}|\theta).$$

Подставляя это выражение в (34) и применяя байесовское правило, получим для определения апостериорной плотности следующее рекуррентное соотношение:

$$p(\theta|\mathcal{X}^n)=\frac{p(\mathbf{x}_n|\theta)\,p(\theta|\mathcal{X}^{n-1})}{\int p(\mathbf{x}_n|\theta)p(\theta|\mathcal{X}^{n-1})\,d\theta}. \qquad (36)$$

Многократно применяя эту формулу с учетом того, что $p(\theta|\mathcal{X}^0)=p(\theta)$, получим последовательность плотностей $p(\theta)$, $p(\theta|\mathbf{x}_1)$, $p(\theta|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ и т. д. Это и есть так называемый *рекурсивный байесовский подход* к оценке параметров. Если последовательность плотностей имеет тенденцию сходиться к дельта-функции Дирака с центром вблизи истинного значения параметра, то это часто называют *байесовским обучением*.

Для большинства обычно встречающихся плотностей $p(\mathbf{x}|\theta)$ последовательность апостериорных плотностей сходится к дельта-функции. Это, грубо говоря, означает, что в случае большого числа выборок существует лишь одно значение θ, которое приводит $p(\mathbf{x}|\theta)$ к такому соответствию с реальностью, т. е. что θ может быть однозначно определено из $p(\mathbf{x}|\theta)$. В этом случае говорят, что плотность $p(\mathbf{x}|\theta)$ *идентифицируема*. Для строгого доказательства сходимости при указанных условиях нужна точная формулировка тре-

буемых свойств величин $p(\mathbf{x}|\theta)$ и $p(\theta)$ и тщательное обоснование выводов, но серьезных трудностей это не представляет.

Существуют, однако, случаи, при которых одно и то же значение $p(\mathbf{x}|\theta)$ получается более чем для одного значения θ. В таких случаях величина θ не может быть определена однозначно из $p(\mathbf{x}|\theta)$, а $p(\theta|\mathcal{X}^n)$ будет иметь пик вблизи каждого из указанных значений θ. К счастью, эта неопределенность исчезает при интегрировании соотношения (14), так как $p(\mathbf{x}|\theta)$ одинакова для всех указанных значений θ. Таким образом, $p(\mathbf{x}|\mathcal{X}^n)$ будет неизбежно сходиться к $p(\mathbf{x})$ независимо от того, идентифицируема или нет $p(\mathbf{x}|\theta)$. Хотя в связи с этим проблема идентифицируемости начинает казаться чем-то не заслуживающим внимания, из гл. 6 мы увидим, что она приобретает первостепенное значение в случае обучения без учителя.

3.6. ДОСТАТОЧНЫЕ СТАТИСТИКИ

На практике формальное решение задачи, задаваемое (14), (34) и (35), лишено привлекательности из-за большого объема вычислений. В задачах классификации образов нередко приходится иметь дело с десятками и сотнями неизвестных параметров и тысячами выборок, что крайне затрудняет непосредственное вычисление и составление таблиц для $p(\mathcal{X}|\theta)$ или $p(\theta|\mathcal{X})$. Вся надежда на то, что для преодоления трудности вычислений можно будет найти параметрическую форму $p(\mathbf{x}|\theta)$, которая, с одной стороны, будет соответствовать существу поставленной задачи, а с другой стороны, даст возможность получить удовлетворительное аналитическое решение.

Рассмотрим, какого рода упрощения можно достичь при решении задачи обучения среднему значению в случае многих нормально распределенных переменных. Если предположить, что априорная плотность $p(\boldsymbol{\mu})$ нормальна, то апостериорная плотность $p(\boldsymbol{\mu}|\mathcal{X})$ также будет нормальной. В равной степени важно и то, что, согласно (31) и (32), главная цель наших действий по обработке данных — это просто вычисление выборочного среднего $\mathbf{m}_n$. В этой статистике, вычисление которой не требует сложных математических преобразований, содержится вся информация, получаемая из выборок и требуемая для получения неизвестного среднего по множеству. Может показаться, что простота эта связана всего лишь с еще одним хорошим свойством, присущим именно нормальному распределению, а в других случаях ее трудно было бы ожидать. Хотя это в большой степени и верно, однако существует группа распределений, для которых можно получить решения, удобные с точки зрения вычислений, причем простота их применения заложена в понятии *достаточной статистики*.

Прежде всего заметим, что любая функция выборок является статистикой. Грубо говоря, достаточная статистика $\mathbf{s}$ есть такая

функция [1]) выборок $\mathscr{X}$, которая содержит полную информацию об оценке некоторого параметра θ. Интуитивно может показаться, что под этим определением достаточной статистики подразумевается удовлетворение требованию $p(\theta|\mathbf{s}, \mathscr{X}) = p(\theta|\mathbf{s})$. Отсюда, однако, последует необходимость обращения с θ как со случайной величиной, из-за чего придется ограничиться байесовским подходом. Стандартное определение поэтому формулируется в следующем виде: говорят, что статистика $\mathbf{s}$ будет *достаточной* для θ, если $p(\mathscr{X}|\mathbf{s}, \theta)$ не зависит от θ. Полагая θ случайной величиной, можно написать

$$p(\theta|\mathbf{s}, \mathscr{X}) = \frac{p(\mathscr{X} \mid \mathbf{s}, \theta)\, p(\theta \mid \mathbf{s})}{p(\mathscr{X} \mid \mathbf{s})},$$

откуда становится очевидным, что $p(\theta|\mathbf{s}, \mathscr{X}) = p(\theta|\mathbf{s})$, если $\mathbf{s}$ достаточна для θ. И обратно, если $\mathbf{s}$ есть статистика, для которой $p(\theta|\mathbf{s}, \mathscr{X}) = p(\theta|\mathbf{s})$, и если $p(\theta|\mathbf{s}) \neq 0$, то легко показать, что $p(\mathscr{X}|\mathbf{s}, \theta)$ не зависит от θ. Таким образом, интуитивное и стандартное определения, по сути дела, эквивалентны.

Основной теоремой для достаточных статистик является *теорема факторизации*, которая утверждает, что $\mathbf{s}$ достаточна для θ тогда и только тогда, когда $p(\mathscr{X}|\theta)$ можно представить как произведение двух функций, одна из которых зависит только от $\mathbf{s}$ и θ, а другая — только от выборок. К достоинствам теоремы следует отнести то, что при определении достаточной статистики она позволяет вместо рассмотрения сравнительно сложной плотности $p(\mathscr{X}|\mathbf{s}, \theta)$ воспользоваться более простой функцией вида

$$p(\mathscr{X} \mid \theta) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k \mid \theta).$$

К тому же, согласно теореме факторизации, выясняется, что свойства достаточной статистики полностью определяются плотностью $p(\mathbf{x}|\theta)$ и не связаны с удачным выбором априорной плотности $p(\theta)$. Доказательство теоремы факторизации для непрерывного случая несколько затруднительно, так как включает вырожденные ситуации. В связи с тем что это доказательство все же представляет определенный интерес, мы приведем его для простейшего дискретного случая.

Теорема факторизации. Статистика $\mathbf{s}$ достаточна для θ тогда и только тогда, когда вероятность $P(\mathscr{X}|\theta)$ можно записать в виде произведения

$$p(\mathscr{X} \mid \theta) = g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathscr{X}). \tag{37}$$

Доказательство. а) Допустим сначала, что $\mathbf{s}$ достаточна для θ, т. е. $P(\mathscr{X}|\mathbf{s}, \theta)$ не зависит от θ. Так как наша цель состоит

[1]) При необходимости различать функцию и ее значение будем использовать запись $\mathbf{s} = \varphi(\mathscr{X})$.

в том, чтобы показать, что $P(\mathcal{X}|\theta)$ можно представить в виде произведения, сосредоточим внимание на выражении $P(\mathcal{X}|\theta)$ через $P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta)$. Проделаем это, суммируя совместные вероятности $P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta)$ для всех значений s:

$$P(\mathcal{X}|\theta) = \sum_{\mathbf{s}} P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta) = \sum_{\mathbf{s}} P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta) P(\mathbf{s}|\theta).$$

Но, поскольку $\mathbf{s}=\varphi(\mathcal{X})$, возможно лишь одно значение для s, так что

$$P(\mathcal{X}|\theta) = P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta) P(\mathbf{s}|\theta).$$

Кроме того, так как, согласно предположению, $P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta)$ не зависит от θ, первый множитель зависит только от $\mathcal{X}$. Отождествляя $P(\mathbf{s}|\theta)$ с $g(\mathbf{s}, \theta)$, можно видеть, что вероятность $P(\mathcal{X}|\theta)$ представима в виде произведения, что и требовалось доказать.

б) Для того чтобы показать, что из существования представления $P(\mathcal{X}|\theta)$ в виде произведения $g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$ следует достаточность статистики s для θ, надо показать, что такое представление означает независимость условной вероятности $P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta)$ от θ. Так как $\mathbf{s}=\varphi(\mathcal{X})$, то установление величины s сводит возможные множества выборок к некоторому множеству $\overline{\mathcal{X}}$. Формально это означает, что $\overline{\mathcal{X}}=\{\mathcal{X}|\varphi(\mathcal{X})=\mathbf{s}\}$. Если $\overline{\mathcal{X}}$ пусто, то никакие заданные значения выборок не могут привести к требуемой величине s, и $P(\mathbf{s}|\theta)=0$. Исключив такие случаи, т. е. рассматривая только те значения s, которые могут быть получены, придем к выражению

$$P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta) = \frac{P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta)}{P(\mathbf{s}|\theta)}.$$

Знаменатель выражения можно вычислить, просуммировав значения числителя для всех значений $\mathcal{X}$. Так как числитель будет равен нулю в случае $\mathcal{X} \notin \overline{\mathcal{X}}$, то можно ограничиться суммированием только для $\mathcal{X} \in \overline{\mathcal{X}}$. Таким образом,

$$P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta) = \frac{P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta)}{\sum\limits_{\mathcal{X} \in \overline{\mathcal{X}}} P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta)}.$$

Но в соответствии с соображениями, которыми мы руководствовались ранее, $P(\mathcal{X}, \mathbf{s}|\theta)=P(\mathcal{X}|\theta)$, так как $\mathbf{s}=\varphi(\mathcal{X})$. Кроме того, следует иметь в виду, что, согласно принятой гипотезе, $P(\mathcal{X}|\theta)=g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$. Таким образом, приходим к выражению

$$P(\mathcal{X}|\mathbf{s}, \theta) = \frac{g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})}{\sum\limits_{\mathcal{X} \in \overline{\mathcal{X}}} g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})} = \frac{h(\mathcal{X})}{\sum\limits_{\mathcal{X} \in \overline{\mathcal{X}}} h(\mathcal{X})},$$

которое не зависит от θ. Отсюда, согласно определению, $\mathbf{s}$ достаточна для θ.

Как будет показано, существуют простые способы построения достаточных статистик. Например, можно определить $\mathbf{s}$ как вектор, компоненты которого представлены n выборками $x_1, \ldots, x_n$, так что $g(\mathbf{s}, \theta) = p(\mathcal{X}|\theta)$ и $h(\mathcal{X}) = 1$. Можно даже построить скалярную достаточную статистику, пользуясь приемом вписания цифр в десятичных разложениях компонент для n выборок. Достаточные статистики такого сорта существенного интереса не представляют, так как не приводят к более простым результатам. Возможность представления функции $p(\mathcal{X}|\theta)$ в виде произведения $g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$ интересна только в случае, когда функция g и достаточная статистика $\mathbf{s}$ просты [1]).

Следует также заметить, что выражение $p(\mathcal{X}|\theta)$ в виде произведения $g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$, очевидно, не единственно. Если $f(\mathbf{s})$ есть любая функция от $\mathbf{s}$, то $g'(\mathbf{s}, \theta) = f(\mathbf{s})\, g(\mathbf{s}, \theta)$ и $h'(\mathcal{X}) = h(\mathcal{X})/f(\mathbf{s})$ есть эквивалентные множители. Такого рода неопределенность можно исключить, введя понятие *ядра плотности*

$$\bar{g}(\mathbf{s}, \theta) = \frac{g(\mathbf{s}, \theta)}{\int g(\mathbf{s}, \theta)\, d\theta}, \tag{38}$$

которое инвариантно для этого вида оценок.

Каково же значение достаточных статистик и ядер плотности при оценке параметров? Общий ответ состоит в том, что функции плотности, содержащие достаточные статистики и простые ядра плотности, используются при практическом оценивании параметров для классификации образов. В случае оценки по максимуму правдоподобия, когда отыскивается величина θ, которая максимизирует $p(\mathcal{X}|\theta) = g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$, можно вполне удовлетвориться величиной $g(\mathbf{s}, \theta)$. В этом случае нормирование посредством (38) не дает больших преимуществ, если $\bar{g}(\mathbf{s}, \theta)$ не проще, чем $g(\mathbf{s}, \theta)$. Удобство применения ядра плотности выявляется в байесовском случае. Если подставить в (34) $p(\mathcal{X}|\theta) = g(\mathbf{s}, \theta)\, h(\mathcal{X})$, то получим

$$p(\theta \mid \mathcal{X}) = \frac{g(\mathbf{s}, \theta)\, p(\theta)}{\int g(\mathbf{s}, \theta)\, p(\theta)\, d\theta}. \tag{39}$$

Если наше апостериорное знание о θ очень неопределенно, то $p(\theta)$ близка к постоянной, мало меняясь с изменением θ. Если $p(\theta)$ близка к равномерной, то $p(\theta|\mathcal{X})$ примерно равна ядру плотности. Грубо говоря, ядро плотности представляет апостериорное

[1]) В математической статистике есть соответствующее нашим требованиям понятие минимальной достаточной статистики. Однако и минимальная достаточная статистика не представляет значительного интереса, если не упрощает вычислений.

распределение параметрического вектора в случае, когда априорное распределение равномерно [1]). Даже когда априорное распределение сильно отличается от равномерного, ядро плотности обычно дает асимптотическое распределение вектора параметров. В частности, когда $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ не дифференцируема и число выборок велико, $g(\mathbf{s}, \boldsymbol{\theta})$ обычно имеет острый пик при некотором значении $\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Если априорная плотность $p(\boldsymbol{\theta})$ непрерывна при $\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}$ и $p(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ не равна нулю, то функция $p(\hat{\boldsymbol{\theta}}|\mathscr{X})$ приближается к ядру плотности $\bar{g}(\mathbf{s}, \boldsymbol{\theta})$.

3.7. ДОСТАТОЧНЫЕ СТАТИСТИКИ И СЕМЕЙСТВО ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Рассмотрим применение теоремы факторизации для получения достаточных статистик на примере хорошо знакомого случая нормального распределения при $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) \sim N(\boldsymbol{\theta}, \Sigma)$. Имеем

$$p(\mathscr{X}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k-\boldsymbol{\theta})^t \Sigma^{-1}(\mathbf{x}_k-\boldsymbol{\theta})\right] =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{nd/2}|\Sigma|^{n/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}(\boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\boldsymbol{\theta} - 2\boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_k^t\Sigma^{-1}\mathbf{x}_k)\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{n}{2}\boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\left(\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k\right)\right] \times$$

$$\times \frac{1}{(2\pi)^{nd/2}|\Sigma|^{n/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k^t\Sigma^{-1}\mathbf{x}_k\right].$$

В этом разложении первый множитель выделяет зависимость $p(\mathscr{X}|\boldsymbol{\theta})$ от $\boldsymbol{\theta}$, а согласно теореме факторизации, видно, что статистика $\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k$ достаточна для $\boldsymbol{\theta}$. Конечно, любая взаимно однозначная функция этой статистики также достаточна для $\boldsymbol{\theta}$, в частности и выборочное среднее

$$\mathbf{m}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k$$

также достаточно для $\boldsymbol{\theta}$. Исходя из этой статистики, можно написать

$$g(\mathbf{m}_n, \boldsymbol{\theta}) = \exp\left[-\frac{n}{2}(\boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\boldsymbol{\theta} - 2\boldsymbol{\theta}^t\Sigma^{-1}\mathbf{m}_n)\right].$$

---

[1]) Если пространство параметров конечно, мы в самом деле можем считать распределение $p(\boldsymbol{\theta})$ равномерным. Хотя в случае непрерывного пространства параметров равномерное распределение невозможно, такое приближение часто и здесь оказывается удовлетворительным.

Воспользовавшись формулой (38) или непосредственной подстановкой, можно получить ядро плотности

$$\bar{g}(\mathbf{m}_n, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \left| \frac{1}{n} \Sigma \right|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\theta - \mathbf{m}_n)^t \left(\frac{1}{n} \Sigma \right)^{-1} (\theta - \mathbf{m}_n) \right].$$

Из этого выражения сразу же выясняется, что $\mathbf{m}_n$ и есть оценка по максимуму правдоподобия для θ. Байесовскую апостериорную плотность можно получить из $\bar{g}(\mathbf{m}_n, \theta)$, выполняя интегрирование согласно (39). Если априорная плотность близка к равномерной, то $p(\theta|\mathcal{X}) = \bar{g}(\mathbf{m}_n, \theta)$.

Такой же общий подход возможен и при определении достаточных статистик для других функций плотности. В частности, он применим к любому из членов *экспоненциального семейства*, группы функций распределения и плотностей, имеющих простые достаточные статистики. В число членов экспоненциального семейства входят нормальное, экспоненциальное, релеевское, пуассоновское и многие другие известные распределения. Все они могут быть записаны в виде

$$p(\mathbf{x} \mid \theta) = \alpha(\mathbf{x}) \exp[\mathbf{a}(\theta) + \mathbf{b}(\theta)^t \mathbf{c}(\mathbf{x})]. \tag{40}$$

Таким образом, получаем

$$p(\mathcal{X} \mid \theta) = \exp\left[n\mathbf{a}(\theta) + \mathbf{b}(\theta)^t \sum_{k=1}^{n} \mathbf{c}(\mathbf{x}_k) \right] \prod_{k=1}^{n} \alpha(\mathbf{x}_k) = g(\mathbf{s}, \theta) h(\mathcal{X}), \tag{41}$$

где можно принять

$$\mathbf{s} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{c}(\mathbf{x}_k), \tag{42}$$

$$g(\mathbf{s}, \theta) = \exp[n \{\mathbf{a}(\theta) + \mathbf{b}(\theta)^t \mathbf{s}\}] \tag{43}$$

и

$$h(\mathcal{X}) = \prod_{k=1}^{n} \alpha(\mathbf{x}_k). \tag{44}$$

Выражения функций распределения, достаточных статистик и ненормированных ядер для некоторых обычно встречающихся членов экспоненциального семейства приведены в табл. 3.1. Вывод из этих выражений оценок по максимуму правдоподобия и байесовских апостериорных распределений вполне обычная вещь. Выражения, за исключением двух, приведены для случая одной переменной, хотя и могут быть использованы для случаев с многими переменными, если можно допустить статистическую независимость [1].

[1]) Если быть более точным, то необходимо предположить, что $p(\mathbf{x}|\omega_j, \theta_j) = \prod_{i=1}^{d} p(x_i|\omega_j, \theta_{ij})$. Когда в литературе встречается утверждение, что «признаки предполагаются статистически независимыми», то почти всегда под этим подразумевается, что они независимы внутри класса.

Таблица 3.1

Общий вид распределений из экспоненциального семейства

Наименование	Распределение	Область определения	s	$[g(s, \theta)]^{1/n}$
Нормальное, с одной переменной	$p(x \mid \theta) = \sqrt{\frac{\theta_2}{2\pi}}\, e^{-(1/2)\,\theta_2 (x-\theta_1)^2}$	$\theta_2 > 0$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k \\ \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k^2 \end{bmatrix}$	$\theta_2^{1/2} e^{-(1/2)\,\theta_2 \left(s_2 - 2\theta_1 s_1 + \theta_1^2\right)}$
Нормальное, с многими переменными	$p(\mathbf{x})\,\theta = \frac{\lvert \Theta_2 \rvert^{1/2}}{(2\pi)^{d/2}}\, e^{-(1/2)\,(\mathbf{x}-\theta_1)^t \cdot \Theta_2\,(\mathbf{x}-\theta_1)}$	Θ_2 положительно определена	$\begin{bmatrix} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k \\ \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k \mathbf{x}_k^t \end{bmatrix}$	$\lvert \Theta_2 \rvert^{1/2} e^{-(1/2)\,(\operatorname{tr}\Theta_2 S_2 - 2\theta_1^t \times \times \Theta_2 s_1 + \theta_1^t \Theta_2 \theta_1)}$
Экспоненциальное	$p(x \mid \theta) = \begin{cases} \theta e^{-\theta x}, & x \geqslant 0 \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases}$	$\theta > 0$	$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k$	$\theta e^{-\theta s}$
Релея	$p(x \mid \theta) = \begin{cases} 2\theta x e^{-\theta x^2}, & x \geqslant 0 \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases}$	$\theta > 0$	$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k^2$	$\theta e^{-\theta s}$
Максвелла	$p(x \mid \theta) = \begin{cases} \frac{4}{\sqrt{\pi}}\, \theta^{3/2} x^2 e^{-\theta x^2}, & x \geqslant 0 \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases}$	$\theta > 0$	$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k^2$	$\theta^{3/2} e^{-\theta s}$

Гамма	$p(x \mid \theta)=\begin{cases} \dfrac{\theta_2^{\theta_1+1}}{\Gamma(\theta_1+1)} x^{\theta_1} e^{-\theta_2 x}, & x \geqslant 0 \\ 0 \quad \text{в противном случае} \end{cases}$	$\theta_1 > -1$ $\theta_2 > 0$	$\left[\left(\prod_{k=1}^{n} x_k\right)^{1/n}\right.$ $\left.\dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k\right]$	$\dfrac{\theta_2^{\theta_1+1}}{\Gamma(\theta_1+1)} s_1^{\theta_1} e^{-\theta_2 s_2}$
Бета	$p(x \mid \theta)=\begin{cases} \dfrac{\Gamma(\theta_1+\theta_2+2)}{\Gamma(\theta_1+1)\Gamma(\theta_2+1)} x^{\theta_1}(1-x)^{\theta_2}, & 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ 0 \quad \text{в противном случае} \end{cases}$	$\theta_1 > -1$ $\theta_2 > -1$	$\left[\left(\prod_{k=1}^{n} x_k\right)^{1/n}\right.$ $\left.\left(\prod_{k=1}^{n}(1-x_k)\right)^{1/n}\right]$	$\dfrac{\Gamma(\theta_1+\theta_2+2)}{\Gamma(\theta_1+1)\Gamma(\theta_2+1)} s_1^{\theta_1} s_2^{\theta_2}$
Пуассона	$P(x \mid \theta)=\dfrac{\theta^x}{x!} e^{-\theta}, \quad x=0, 1, 2, \ldots$	$\theta > 0$	$\dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k$	$\theta^s e^{-\theta}$
Бернулли	$P(x \mid \theta)=\theta^x (1-\theta)^{1-x}, \quad x=0, 1$	$0 < \theta < 1$	$\dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k$	$\theta^s (1-\theta)^{1-s}$
Биномиальное	$P(x \mid \theta)=\dfrac{m!}{x!(m-x)!} \theta^x (1-\theta)^{m-x}, \quad x=0, 1, \ldots, m$	$0 < \theta < 1$	$\dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k$	$\theta^s (1-\theta)^{m-s}$
Полиномиальное	$P(\mathbf{x} \mid \theta)=\dfrac{m!}{\prod_{i=1}^{d} x_i!} \prod_{i=1}^{d} \theta_i^{x_i}, \; x_i=0, 1, 2, \ldots, \; \sum_{i=1}^{d} x_i = m$	$0 < \theta_i < 1$ $\sum_{i=1}^{d} \theta_i = 1$	$\dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k$	$\prod_{i=1}^{d} \theta_i^{s_i}$

Было бы приятно отметить в заключение, что полученные результаты составляют набор средств, достаточный для решения большинства задач из области классификации образов. К сожалению, все обстоит иначе. В применении ко многим случаям указанные члены экспоненциального семейства с их плавным изменением и однообразием формы не представляют хорошего приближения реально встречающихся плотностей. Часто применяемое упрощающее предположение о статистической независимости далеко не всегда оказывается справедливым. В случае когда применение функции из экспоненциального семейства и дает хорошее приближение неизвестной плотности, обычно бывает необходимо оценивать множество неизвестных параметров, а в распоряжении имеется только ограниченное число выборок. Как мы увидим, это может привести к тому, что оптимальные оценки дадут малоудовлетворительные результаты, и даже к тому, что «оптимальные» системы будут выполнять свои функции хуже, нежели «почти оптимальные».

3.8. ПРОБЛЕМЫ РАЗМЕРНОСТИ

3.8.1. НЕОЖИДАННАЯ ТРУДНОСТЬ

В применении к случаям многих классов нередко приходится сталкиваться с задачами, содержащими до ста признаков, особенно если эти признаки бинарные. Исследователь обычно полагает, что каждый признак может быть полезен хотя бы для одного разделения. Он может и сомневался, что каждый из признаков обеспечивает независимую информацию, но заведомо излишние признаки им не привлекались.

Для случая статистически независимых признаков имеются результаты некоторых теоретических исследований, которые подсказывают нам, как поступить наилучшим образом. Рассмотрим, например, многомерный нормальный случай для двух классов, когда $p(\mathbf{x}|\omega_j) \sim N(\mu_j, \Sigma)$, $j=1, 2$. Когда априорные вероятности равны, то нетрудно показать, что байесовский уровень ошибки определяется выражением

$$P(e) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r/2}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2} u^2\right] du, \tag{45}$$

где r^2 есть квадратичное махалонобисово расстояние

$$r^2 = (\mu_1 - \mu_2)^t \Sigma^{-1} (\mu_1 - \mu_2). \tag{46}$$

Таким образом, вероятность ошибки убывает с ростом r, стремясь к нулю при стремлении r к бесконечности. В случае независимых переменных $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_d^2)$ и

$$r^2 = \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{\mu_{i1} - \mu_{i2}}{\sigma_i}\right)^2. \tag{47}$$

Отсюда видно, что каждый из признаков влияет на уменьшение вероятности ошибки. Наилучшими в этом смысле являются те признаки, у которых разность средних значений велика по сравнению со стандартными отклонениями. Вместе с тем ни один из признаков не бесполезен, если его средние значения для разных классов различны. Поэтому для дальнейшего уменьшения уровня ошибки надо, очевидно, ввести новые, независимые признаки. Хотя вклад каждого нового признака и не очень велик, однако если беспредельно увеличивать r, то вероятность ошибки можно сделать сколь угодно малой.

Естественно, если результаты, получаемые при использовании данного множества признаков, нас не устраивают, можно попытаться добавить новые признаки, особенно такие, которые способствуют разделению пар классов, с которыми чаще всего происходила путаница. Хотя увеличение числа признаков удорожает и усложняет выделитель признаков и классификатор, оно приемлемо, если есть уверенность в улучшении качества работы. При всем этом, если вероятностная структура задачи полностью известна, добавление новых признаков не увеличит байесовский риск и в худшем случае байесовский классификатор не примет их во внимание, а если эти признаки все же несут дополнительную информацию, то качество работы должно улучшиться.

К сожалению, на практике часто наблюдается, что, вопреки ожиданиям, добавление новых признаков ухудшает, а не улучшает качество работы. Это явное противоречие составляет весьма серьезную проблему при разработке классификатора. Главный источник этого можно усмотреть в конечности числа исходных выборок. В целом же данный вопрос требует сложного и тонкого анализа. Простейшие случаи не дают возможности экспериментального наблюдения указанного явления, тогда как случаи, близкие к реальным, оказываются сложными для анализа. С целью внести некоторую ясность, обсудим ряд вопросов, относящихся к проблемам размерности и объема выборки. В связи с тем что большинство результатов анализа будет дано без доказательств, заинтересованный читатель найдет соответствующие ссылки в библиографических и исторических замечаниях.

3.8.2. ОЦЕНКА КОВАРИАЦИОННОЙ МАТРИЦЫ

Начнем наш анализ с задачи оценки ковариационной матрицы. Для этого требуется оценить $d(d+1)/2$ параметров, из которых d диагональных элементов и $d(d-1)/2$ независимых недиагональных элементов. Сначала мы видим, что оценка по максимуму правдоподобия

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} (\mathbf{x}_k - \mathbf{m}_n)(\mathbf{x}_k - \mathbf{m}_n)^t$$

представляет собой сумму $n-1$ независимых матриц размера $d \times d$ единичного ранга, чем гарантируется, что она является вырожденной при $n \leqslant d$. Так как для нахождения разделяющих функций необходимо получить величину, обратную $\hat{\Sigma}$, у нас уже есть алгебраические условия, связывающие по крайней мере $d+1$ выборок. Неудивительно, что сглаживание случайных отклонений для получения вполне приемлемой оценки потребует в несколько раз большего числа выборок.

Часто встает вопрос, как быть, если число имеющихся в распоряжении выборок недостаточно. Одна из возможностей — уменьшить размерность, либо перестраивая выделитель признаков, либо выбирая подходящее подмножество из имеющихся признаков, либо некоторым образом комбинируя имеющиеся признаки[1]). Другая возможность — это предположить, что все c классов входят в одну ковариационную матрицу, т. е. объединить имеющиеся данные. Можно также попробовать найти лучшую оценку для Σ. Если есть какая-нибудь возможность получить приемлемую априорную оценку Σ_0, то можно воспользоваться байесовской или псевдобайесовской оценкой вида $\lambda\Sigma_0+(1-\lambda)\hat{\Sigma}$. Если матрица Σ_0 диагональная, то уменьшается вредное влияние «побочных» корреляций. С другой стороны, от случайных корреляций можно избавиться эвристически, взяв за основу ковариационную матрицу выборок. Например, можно положить все ковариации, величина коэффициента корреляции в которых не близка к единице, равными нулю. В предельном случае при таком подходе предполагается статистическая независимость, означающая, что все недиагональные элементы равны нулю, хотя это и может противоречить опытным данным. Даже при полной неуверенности в правильности такого рода предположений получаемые эвристические оценки часто обеспечивают лучший образ действий, нежели при оценке по максимуму правдоподобия.

Здесь мы приходим к другому явному противоречию. Можно быть почти уверенным, что классификатор, который строится в предположении независимости, не будет оптимальным. Понятно, что он будет работать лучше в случаях, когда признаки в самом деле независимы, но как улучшить его работу, когда это предположение неверно?

Ответ на это связан с проблемой недостаточности данных, и пояснить ее сущность в какой-то мере можно, если рассмотреть аналогичную поставленной задачу подбора кривой по точкам. На рис. 3.3 показана группа из пяти экспериментальных точек и некоторые кривые, предлагаемые для их аппроксимации. Экспериментальные точки были получены добавлением к исходной параболе независимого шума с нулевым средним значением. Следовательно, если считать, что последующие данные будут получаться таким же

[1]) Мы еще вернемся к вопросам уменьшения размерности в гл. 4 и 6.

образом, то среди всех полиномов парабола должна обеспечить наилучшее приближение. Вместе с тем неплохое приближение к имеющимся данным обеспечивает и приведенная прямая. Однако мы знаем, что парабола дает лучшее приближение, и возникает вопрос, достаточно ли исходных данных, чтобы можно было это предположить. Парабола, наилучшая для большого числа данных, может оказаться совершенно отличной от исходной, а за пределами приведенного интервала легко может одержать верх и прямая линия. Отлично аппроксимируются приведенные данные кривой десятого порядка. Тем не менее никто не будет ожидать, что полученное таким образом предполагаемое решение окажется в хорошем соответствии с вновь получаемыми данными. И действительно, для получения хорошей аппроксимации посредством кривой десятого порядка потребуется намного больше выборок, чем для кривой второго порядка, хотя последняя и является частным случаем той. Вообще надежная интерполяция или экстраполяция не может быть достигнута, если она не опирается на избыточные данные.

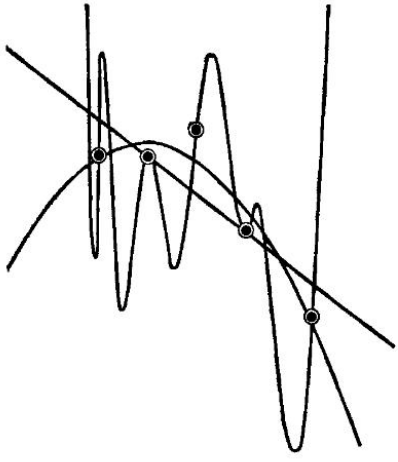


Рис. 3.3. Подбор кривых по заданным точкам.

3.8.3. ЕМКОСТЬ РАЗДЕЛЯЮЩЕЙ ПЛОСКОСТИ

Наличие избыточных данных для классификации столь же важно, как и для оценки. В качестве сравнительно простого примера рассмотрим разбиение d-мерного пространства признаков гиперплоскостью $\mathbf{w}^t\mathbf{x}+w_0=0$. Допустим, что имеется общее расположение n выборочных точек[1]), с каждой из которых можно сопоставить метку ω_1 или ω_2. Среди 2^n возможных дихотомий (разделений на два класса) n точек в d-мерном пространстве имеется некоторая доля $f(n, d)$, так называемых линейных дихотомий. Это такая маркировка точек, при которой существует гиперплоскость, отделяющая точки, помеченные ω_1, от точек, помеченных ω_2. Можно показать, что эта

[1]) Говорят, что точки в d-мерном пространстве находятся в *общем расположении*, если никакое из подмножеств, содержащих $(d+1)$ точек, не попадает в одно $(d-1)$-мерное подпространство.

доля определяется выражением

$$f(n, d)=\begin{cases} 1, & n \leqslant d+1, \\ \frac{2}{2^n}\sum_{i=0}^{d}\binom{n-1}{i}, & n > d+1. \end{cases} \tag{48}$$

График этой функции для разных значений d приведен на рис. 3.4. Заметим, что все дихотомии для $d+1$ и менее точек линейны. Это значит, что гиперплоскость не ограничивается требованием пра-

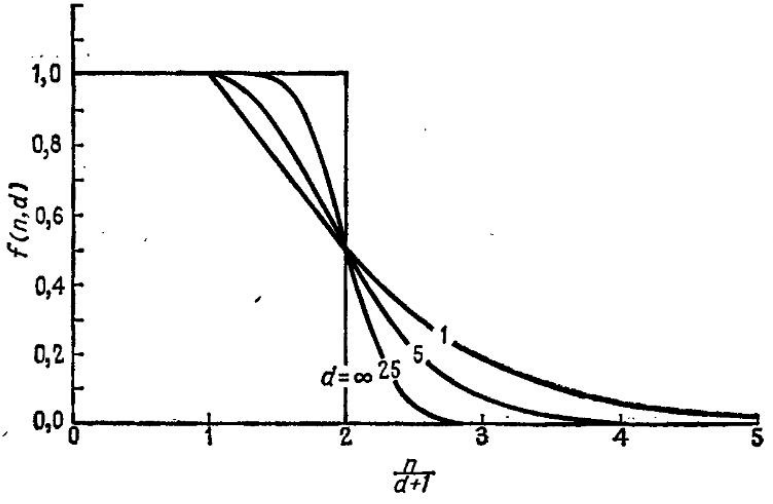


Рис. 3.4. Доля линейных дихотомий n точек в d-мерном пространстве.

вильной классификации $d+1$ или меньшего числа точек. Фактически при большом d, пока n не составляет значительной части от $2(d+1)$, это не означает, что задача начинает становиться трудной. При значении числа $n=2(d+1)$, которое иногда называется *емкостью* гиперплоскости, половина из возможных дихотомий еще линейна.

Таким образом, избыточность для построения линейных разделяющих функций до тех пор не будет достигнута, пока число выборок в несколько раз не превзойдет размерности пространства признаков.

3.8.4. УРОВЕНЬ ОШИБКИ, УСРЕДНЕННЫЙ ПО ЗАДАЧАМ

Приведенные примеры позволяют, таким образом, заключить, что при малом числе выборок вся проблема в том, что разрабатываемый классификатор не будет хорошо работать при получении новых данных. Мы можем, таким образом, полагать, что уровень ошибки явится функцией числа n выборок, убывающей до некоторого минимального значения при стремлении n к бесконечности.

Чтобы исследовать это теоретически, требуется выполнить следующие действия:

1) произвести оценку неизвестных параметров по выборкам;
2) применить эти оценки для определения классификатора;
3) вычислить уровень ошибки полученного классификатора.

В целом такой анализ очень сложен. Проведение его зависит от многих причин — частных значений получаемых выборок, способа их использования для определения классификатора и неизвестной вероятностной структуры, положенной в основание расчетов. Одиако аппроксимируя иеизвестные плотности гистограммами и усредняя их соответствующим образом, можно прийти к некоторым интересным выводам.

Рассмотрим случай с двумя классами, предполагаемыми равновероятными. Предположим, что пространство признаков мы разбили на некоторое число m отдельных ячеек $\mathscr{C}_1, \ldots, \mathscr{C}_m$. Если в пределах каждой из ячеек условные плотности $p(\mathbf{x}|\omega_1)$ и $p(\mathbf{x}|\omega_2)$ заметно не изменяются, то вместо того, чтобы отыскивать точное значение $\mathbf{x}$, потребуется лишь определить, в какую из ячеек попадает $\mathbf{x}$. Это упрощает задачу, сводя ее к дискретной. Пусть $p_i = P(\mathbf{x} \in \mathscr{C}_i|\omega_1)$ и $q_i = P(\mathbf{x} \in \mathscr{C}_i|\omega_2)$. Тогда, поскольку мы предположили, что $P(\omega_1) = P(\omega_2) = 1/2$, векторы $\mathbf{p} = (p_1, \ldots, p_m)^t$ и $\mathbf{q} = (q_1, \ldots, q_m)^t$ определят вероятностную структуру задачи. Если $\mathbf{x}$ попадает в $\mathscr{C}_i$, то байесовское решающее правило выразится в принятии решения ω_i, если $p_i > q_i$. Получаемый байесовский уровень ошибки определится выражением

$$P(e|\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} \min[p_i, q_i].$$

Если параметры $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ неизвестны и должны быть оценены по множеству выборок, то получаем уровень ошибки, больший, чем байесовский. Точный ответ будет зависеть от взятого множества выборок и способа построения по ним классификатора. Допустим, что одна половина выборок помечена ω_1, а другая ω_2, причем n_{ij} представляет число выборок с пометкой ω_j, попавших в ячейку $\mathscr{C}_i$. Допустим далее, что мы строим классификатор, пользуясь оценками по максимуму правдоподобия $\hat{p}_i = 2n_{i1}/n$ и $\hat{q}_i = 2n_{i2}/n$, как если бы они и были истинными значениями. Тогда новый вектор признаков, попадающий в $\mathscr{C}_i$, будет отнесен к ω_1, если $n_{i1} > n_{i2}$. Со всеми этими предположениями вероятность ошибки для получаемого классификатора определится выражением

$$P(e|\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathscr{X}) = \frac{1}{2}\sum_{n_{i1} > n_{i2}} q_i + \frac{1}{2}\sum_{n_{i1} \leqslant n_{i2}} p_i.$$

Чтобы оценить вероятность ошибки, надо знать истинные значения условных вероятностей $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ и множество выборок или по меньшей мере числа n_{ij}. Различные множества из n случайных выборок приведут к различным значениям $P(e|\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathcal{X})$.

Для усреднения n случайных выборок по всем возможным множествам и получения средней вероятности ошибки $P(e|\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathcal{X})$ можно использовать тот факт, что числа n_{ij} распределены по полиномиальному закону. Грубо говоря, это даст типичный уровень ошибки, который можно ожидать для n выборок. Однако оценка этого среднего уровня потребует еще решения второстепенной задачи — оценки величин $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Если $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ различаются сильно, то средний уровень ошибки будет близок к нулю; при сходных $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ он приближается к 1/2.

Радикальным путем устранения этой зависимости решения от задачи будет усреднение результатов решения всех возможных задач. Для этого следует выбрать некоторое априорное распределение неизвестных параметров $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, а затем усреднить $P(e|\mathbf{p}, \mathbf{q}, n)$ в соответствии с этими $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Получаемая *усредненная по задачам вероятность ошибки* $\bar{P}(e|m, n)$ будет зависеть только от числа m ячеек, числа n выборок и вида априорного распределения.

Выбор априорного распределения является, несомненно, тонким моментом. Стараясь облегчить задачу, мы можем принять величину $\bar{P}$ близкой к 0, а стараясь ее усложнить — близкой к 1/2. Априорное распределение следовало бы выбирать соответствующим тому классу задач, с которым мы обычно встречаемся, однако не ясно, как это сделать. Можно просто предположить эти задачи «равномерно распределенными», т. е. предположить, что векторы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ распределены равномерно на симплексах $p_i \geqslant 0$, $\sum_{i=1}^{m} p_i = 1$, $q_i \geqslant 0$, $\sum_{i=1}^{m} q_i = 1$. Г. Ф. Хугсом, предположившим такой подход, проведены необходимые вычисления, результаты которых представлены графиками рис. 3.5. Рассмотрим некоторые приложения его результатов.

Заметим сначала, что эти кривые представляют $\bar{P}$ как функцию числа ячеек для постоянного числа выборок. Если число выборок бесконечно, то становятся верны оценки по максимуму правдоподобия, и $\bar{P}$ для любой задачи будет средним значением байесовского уровня ошибки. Кривая, соответствующая $\bar{P}(e|m, \infty)$, быстро убывает от 0,5 при $m=1$ до асимптотического значения 0,25 при стремлении m к бесконечности. Не удивительно, что $\bar{P}=0{,}5$ при $m=1$, так как в случае всего лишь одного элемента решение должно основываться только на априорных вероятностях. Эффектно и то, что $\bar{P}$ стремится к 0,25 при стремлении m к бесконечности, так как эта величина находится как раз посередине между предельными значе-

ниями 0,0 и 0,5. Столь большое значение уровня ошибки свидетельствует лишь о том, что в этой средней величине отражено множество безнадежно трудных задач, связанных с классификацией. И конечно, не следует считать, что «типичная» задача распознавания образов может иметь такой уровень ошибки.

Однако самая интересная особенность этих кривых заключается в том, что для каждой из них, соответствующей конечному числу выборок, имеется оптимальное число ячеек. Это непосредственно связано с тем, что если при конечном числе выборок использовать

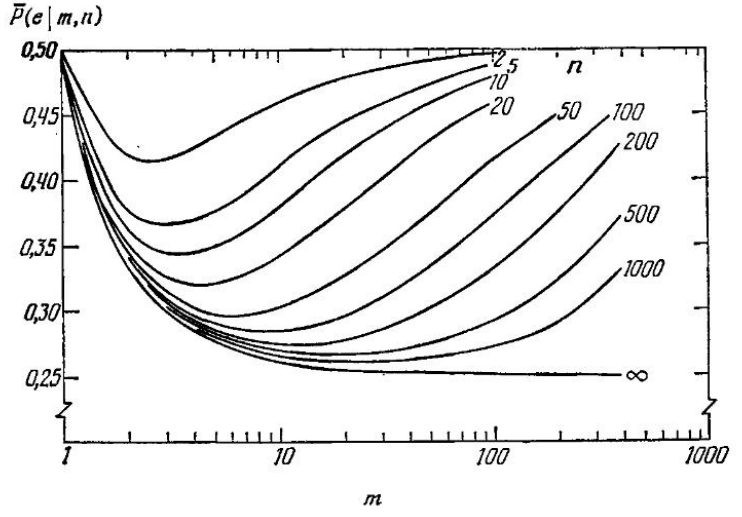


Рис. 3.5. Усредненный по задаче уровень ошибки (по данным Г. Ф. Хугса, 1968. Здесь n — число выборок, m — число ячеек).

излишнее количество признаков, то качество работы ухудшится. Почему это так, в данном случае ясно. Во-первых, увеличение числа ячеек позволяет легче различать $p(\mathbf{x}|\omega_1)$ и $p(\mathbf{x}|\omega_2)$ (представляемые векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$), тем самым способствуя улучшению качества работы. Если, однако, число ячеек становится слишком большим, то не хватит выборок, чтобы их заполнить. В конечном счете число выборок в большинстве ячеек окажется равным нулю, и для классификации придется вернуться к неэффективным априорным вероятностям. Таким образом, при любом конечном n величина $\bar{P}(e|m,n)$ должна стремиться к 0,5 при стремлении m к бесконечности.

Значение m, для которого $\bar{P}(e,|\, m,\, n)$ достигает минимума, чрезвычайно мало. При числе выборок $n=500$ эта величина лежит где-то около $m=20$ ячеек. Допустим, что мы сформировали ячейки посредством разбиения каждой оси на l интервалов. Тогда для d признаков получим $m=l^d$ ячеек. Это будет означать, что при $l=2$, т. е.

предельно грубом квантовании, использование более четырех-пяти бинарных признаков ухудшит, а не улучшит качество работы. Такой результат весьма пессимистичен, но не более чем утверждение о том, что средний уровень ошибки равен 0,25. Приведенные численные значения получены в соответствии с априорным распределением, выбранным для конкретной задачи, и могут не иметь отношения к частным задачам, с которыми можно еще столкнуться. Основной замысел проведенного анализа состоит в том, чтобы усвоить, что качество работы классификатора безусловно зависит от числа конструктивных выборок и что при заданном числе выборок увеличение числа признаков сверх определенного может оказаться вредным.

3.9. ОЦЕНКА УРОВНЯ ОШИБКИ

Существуют по меньшей мере две причины, чтобы пожелать узнать уровень ошибки классификатора. Первая причина — это оценить, достаточно ли хорошо работает классификатор, чтобы считать его работу удовлетворительной. Вторая состоит в сравнении качества его работы с неким конкурирующим устройством.

Один из подходов к оценке уровня ошибки состоит в вычислении его, исходя из предполагаемой параметрической модели. Например, при разделении на два класса в случае многих нормально распределенных величин можно вычислить $P(e)$ посредством уравнений (45) и (46), подставляя оценки средних значений и ковариационных матриц неизвестных параметров. Такой подход связан, однако, с тремя серьезными трудностями. Во-первых, оценка таким способом $P(e)$ почти всегда оказывается излишне оптимистичной, так как при этом будут скрыты особенности, связанные со своеобразием и непредставительностью конструктивных выборок. Вторая трудность заключается в том, что всегда следует сомневаться в справедливости принятой параметрической модели; оценка работы, основанная на той же самой модели, не внушает доверия, за исключением случаев, когда она неблагоприятна. И наконец, в большинстве общих случаев точное вычисление уровня ошибки очень трудно, даже если полностью известна вероятностная структура задачи.

Эмпирический подход, позволяющий избежать указанных трудностей, состоит в экспериментальных испытаниях классификатора. На практике это часто осуществляется подачей на классификатор системы *контрольных выборок* с оценкой уровня ошибки по части выборок, классификация которых оказалась неверной. Излишне говорить, что контрольные выборки должны быть отличными от конструктивных, иначе оцениваемый уровень ошибок окажется излишне оптимистичным [1]). Если истинный, но неизвестный уровень

[1]) В ранних работах по распознаванию образов, когда эксперименты нередко проводились с весьма малым количеством выборок, при проектировании и испы-

ошибки классификатора равен p и если классификация k из n независимых, случайно взятых контрольных выборок неверна, то распределение k биномиально [1]):

$$P(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}. \tag{49}$$

Таким образом, неверно классифицированная часть пробных выборок и есть в точности оценка p по максимуму правдоподобия:

$$\hat{p} = \frac{k}{n}. \tag{50}$$

Свойства этой оценки для параметра p биномиального распределения хорошо известны. В частности, на рис. 3.6 изображены графики зависимости величины 95%-ного доверительного интервала от $\hat{p}$ и n. Для заданного значения $\hat{p}$ вероятность того, что истинное значение p лежит в интервале между нижней и верхней кривыми при заданном числе n пробных выборок, равна 0,95. Из кривых видно, что, пока n не очень велико, оценку по максимуму правдоподобия следует принимать с осторожностью. Например, если не было ошибок на 50 пробных выборках, то истинный уровень ошибок лежит в пределах от 0 до 8%. Чтобы быть вполне уверенным в том, что истинный уровень ошибок менее 2%, классификатор не должен ошибиться более чем на 250 пробных выборках.

Потребность в данных для построения классификатора и добавочных данных для его оценки представляет дилемму для проектировщика. Если большую часть своих данных он оставит для проектирования, то у него не будет уверенности в результатах испытаний. Если большую часть данных он оставит для испытаний, то не получит хорошего устройства. Хотя вопрос о том, как лучше разделить множество выборок на конструктивное и контрольное подмножества, в какой-то мере исследовался и много раз обсуждался, однако окончательного ответа на него все еще нет.

таниях классификатора нередко использовались одни и те же данные. Такой неверный подход обычно назывался «испытанием по тренировочным данным». Родственная, хотя и менее очевидная задача соответствует случаю, когда классификатор подвергается многим последовательным усовершенствованиям, проводимым на основании повторных испытаний при одних и тех же экспериментальных данных. Такого вида «испытание по тренировочным данным» часто кажется привлекательным до получения новых пробных выборок.

[1]) Чтобы это предположение оказалось верным, состояния природы должны выбираться случайно. В результате в задачах со многими классами некоторые классы могут вообще не быть представлены. Чтобы обойти эту неприятность, явно вызванную малым числом выборок, обычно принято делать число пробных выборок для каждого класса хотя бы грубо соответствующим априорным вероятностям. При этом оценка уровня ошибок уточняется, однако точный анализ усложняется.

В действительности, чтобы построить классификатор и испытать его, имеется много способов и помимо разделения данных. Например, можно многократно повторять процесс, каждый раз используя различное разделение и усредняя оценки получаемых уровней ошибок. Если не важны затраты на вычисления, то имеются веские аргументы в пользу того, чтобы проделать это n раз, используя каждый раз $n-1$ выборок для проектирования и только одну вы-

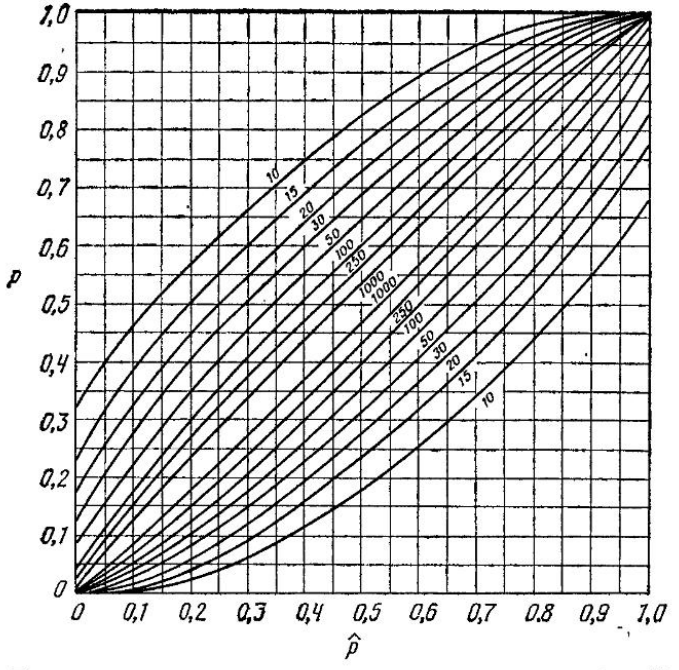


Рис. 3.6. Доверительные интервалы для оценок по уровню ошибки (Хайлимаи, 1962).

борку для испытания. Основное преимущество такого подхода состоит в том, что при каждом проектировании используются фактически все выборки, что дает возможность получить хорошее устройство, а с другой стороны, в испытаниях также используются все выборки. Эта процедура, которую можно назвать «поштучным исключением», особо привлекательна, если число имеющихся выборок слишком мало. Если же число выборок очень велико, то, вероятно, достаточно разделить данные отдельно на конструктивное и контрольное множества. Так как руководящих принципов для проектировщика в промежуточных ситуациях не существует, по крайней мере утешительно иметь большое число различных приемлемых вариантов решения.

3.10. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Оценка параметров составляет основной предмет математической статистики, весьма полно представленный во многих классических трудах, таких, как работы Хоула (1971) и Уилкса (1962). Обычно на практике применяются оценки по максимуму правдоподобия и байесовские оценки, причем в качестве последних часто используется среднее значение апостериорного распределения $p(\theta|\mathcal{X})$. Оценка по максимуму правдоподобия введена Р. А. Фишером, указавшим на многие ее замечательные свойства. К таким свойствам, в частности, относится возможность избежать решения сложного вопроса выбора соответствующей априорной плотности $p(\theta)$.

Необдуманное применение лапласовского принципа недостаточного основания для введения предположения о равномерных априорных распределениях, а также принятие предположения о случайности параметра, который всего-навсего неизвестен, столь сурово осуждались Фишером и Нейманом, что принципиальная основа байесовской оценки стала пользоваться дурной репутацией. В последние годы байесовским методам возвращена их былая респектабельность, что отчасти объясняется той легкостью, с которой они связывают известными условиями неизвестные параметры.

С введением новых принципов, таких, как принцип максимума энтропии, разъяснились некоторые старые парадоксы (Джайнес, 1968). Более спорная, но тем не менее живительная поддержка была оказана «субъективистской» или «индивидуалистской» школой статистиков, рассматривающей априорные распределения как средство выражения нашего представления о неизвестных параметрах (Сэвидж, 1962). Так как в обычных условиях байесовские оценки и оценки по максимуму правдоподобия приводят примерно к одним и тем же результатам, то, если объем выборки достаточен, принципиальное различие этих оценок редко имеет важные последствия.

Байесовский подход к обучению при распознавании образов основан на предположении, что подходящим путем использования выборок при неизвестных условных плотностях является вычисление $P(\omega_i|x, \mathcal{X})$ (Браверман, 1962). Абрамсоном и Брейерманом (1962) получено рекуррентное байесовское решение для обучения среднему в случае нормальной плотности, а Кин (1965) развил это решение на случай, когда неизвестны вектор среднего значения и ковариационная матрица. Байесовское обучение для ряда нестационарных и отличных от нормального случаев исследовалось Байснером (1968) и Ченом (1969). Как пример использования байесовского обучения в самом общем смысле Лейниотисом (1970) установлена связь между нормальным решением для случая многих переменных и хорошо известными результатами из других областей, а именно кальмановской фильтрацией в теории управления и корреляционно-оценочным детектированием в теории связи. Чином и Фу

(1967) исследовалась сходимость этих оценок посредством сопоставления байесовского обучения и стохастической аппроксимации. Хорошее, сжатое изложение вопросов сходимости предложено Аоки (1965).

Получение простого выражения для апостериорной плотности $p(\theta|\mathscr{X})$ обычно требует тщательного выбора априорной плотности $p(\theta)$, так называемой «естественно сопряженной» плотности. Спреджинсом (1965) показано, что существенное упрощение при использовании воспроизводящих плотностей получается не за счет какого-либо особого свойства априорной плотности, а благодаря наличию простой достаточной статистики для $p(\mathbf{x}|\theta)$. Введение достаточных статистик — еще один вклад Фишера. Строгое обоснование теоремы факторизации получено Леманом (1959), а анализ плотностей, приводящих к простым достаточным статистикам, проведен Дынкиным (1951).

Проблемы, связанные с увеличением размерности, ясно разобраны в статье Кенала и Чандрасекарана (1968), оказавшей влияние и на наше отношение к данному вопросу. Задачи эти не сводятся только к параметрическим методам; кстати, применение к ним непараметрических методов более строго будет изложено в гл. 4 и 5. Хотя задачами такого рода насыщены многие из практических проектов, в ранних изданиях им уделялось мало внимания, видимо, в связи со сложностью анализа. Однако следы этих задач можно усмотреть в частых замечаниях о возможном несоответствии или непредставительности имеющихся данных. Кенал и Рендал (1964), рассмотрев задачу оценки ковариационных матриц, пришли к оценке, предложенной для частного случая Т. Дж. Харли, и сочли ее весьма важной. Исчерпывающие исследования, касающиеся линейного разделения, и распространение их на другие виды разделяющих поверхностей опубликованы Ковером (1965), указавшим на возможность их применения при обработке конструктивных выборок. Олейс (1966) рассмотрел задачу оценки, в которой переменные были распределены нормально, а для неизвестных параметров использовались оценки по максимуму правдоподобия. На основании проведенного анализа им были обоснованы условия, при которых увеличение числа переменных может повлечь за собой рост ожидаемого квадратичного отклонения, он же пришел к мысли, что сходные явления возможны и в задачах классификации. К сожалению, в простых случаях это явление места не имеет. Результаты, полученные Чандрасекараном (1971), показывают, что если признаки статистически независимы, то эффект этот не проявляется никогда. Таким образом, это явление относится к трудным для анализа зависимым случаям.

Хугс (1968) предложил усреднение по задачам и разрубил этот гордиев узел, объединив задачи классификации всех типов — с полной зависимостью, полной независимостью и все промежуточные случаи. Так как усредненный по задачам уровень ошибки сначала

убывает до некоторого минимума, а затем возрастает с ростом числа признаков, то можно прийти к заключению, что такое поведение типично при ограниченном числе выборок. Нами приведены результаты для случая, когда два класса предполагаются одинаково правдоподобными. Хугсом рассмотрены также уровни ошибок для случаев произвольных априорных вероятностей, но разъяснение этих результатов слишком трудно, поскольку они бывают иногда даже хуже, чем при учете только априорных вероятностей. Абенд и Харли (1969) пришли к выводу, что это поведение обусловлено использованием оценок по максимуму правдоподобия вместо байесовских, а Чандрасекаран и Харли (1969) получили и исследовали усредненный по задачам уровень ошибки для байесовского случая. При равенстве априорных вероятностей и равенстве числа выборок в каждом классе результаты байесовских оценок и оценок по максимуму правдоподобия оказываются одинаковыми.

Другим источником дискуссий в ранних работах по распознаванию образов явился вопрос об оценке действия и сравнении различных классификаторов. Частично это можно представить из заметок по распознаванию рукописных букв, опубликованных в июне 1960 г. и марте 1961 г. в *IRE Transactions on Electronic Computers*. Общая процедура использования некоторых выборок для построения и резервирования запаса для контроля часто называется *удержанием* или *H*-методом. Исследования Хайлимана (1962) указывают на необходимость чрезвычайно большого числа пробных выборок, однако Кенал и Чандрасекаран (1968) показали, что анализ, по существу, и предназначен для случая многих выборок. Проведенное Лахенбруком и Миккей (1968) исследование методом Монте-Карло явилось свидетельством превосходства метода поштучного исключения, который они назвали *U*-методом. Хотя при применении этого метода и требуется n-кратное построение классификатора, они показали, что по крайней мере в случае нормального распределения работа, связанная с повторным обращением ковариационных матриц, может быть значительно уменьшена посредством применения тождества Бартлетта (см. задачу 10). Введенные Фукунагой и Кесселем (1971) простые и точные формулы свидетельствуют о том, что дополнительных расчетов в этом случае требуется совсем немного.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Абенд, Харли (Abend K., Harley T. J., Jr.)
Comments 'On the mean accuracy of statistical pattern recognizers', *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-15**, 420—421 (May 1969).

Абрамсон, Браверман (Abramson N., Braverman D.)
Learning to recognize patterns in a random environment, *IRE Trans. Info. Theory*, **IT-8**, S58—S63 (September 1962).

Аоки (Aoki M.)
On some convergence questions in Bayesian optimization problems, *IEEE Trans. Auto. Control*, **AC-10**, 180—182 (April 1965).

Байснер (Beisner H. M.)
A recursive Bayesian approach to pattern recognition, *Pattern Recognition*, **1**, 13—31 (July 1968).
Браверман (Braverman D.)
Learning filters for optimum pattern recognition, *IRE Trans. Info. Theory*, **IT-8**, 280—285 (July 1962).
Джайнес (Jaynes E. T.)
Prior probabilities, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-4**, 227—241 (September 1968).
Дынкин Е. Б.
Необходнмые н достаточные статистнки для семейства распределенй вероятностей, *УМН*, **6**:1, 68—90 (1951).
Кенал, Рендал (Kanal L. N., Randall N. C.)
Recognition system design by statistical analysis, ACM, Proc. 19th Nat. Conf., pp. D2.5-1 — D2.5-10 (August 1964).
Кенал, Чандрасекаран (Kanal L. N., Chandrasekaran B.)
On dimensionality and sample size in statistical pattern classification, *Proc. NEC*, **24**, 2—7 (1968); also in *Pattern Recognition*, **3**, 225—234 (October 1971).
Кин (Keehn D. G.)
A note on learning for gaussian properties, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-11**, 126—132 (January 1965).
Ковер (Cover T. M.)
Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-14**, 326—334 (June 1965).
Лейннотнс (Lainiotis D. G.)
Sequential structure and parameter-adaptive pattern recognition — part I: supervised learning, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-16**, 548—556 (September 1970).
Лахенбрук, Миккей (Lachenbruch P. A., Mickey M. R.)
Estimation of error rates in discriminant analysis, *Technometrics*, **10**, 1—11 (February 1968).
Леман (Lehmann E. L.)
Testing Statistical Hypotheses (John Wiley, New York, 1959).
Олейс (Allais D. C.)
The problem of too many measurements in pattern recognition and prediction, *IEEE Int. Con. Rec.*, Part 7, 124—130 (March 1966).
Спреджинс (Spragins J.)
A note on the iterative application of Bayes' rule, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-11**, 544—549 (October 1965).
Сэвидж (Savage L. J.)
The Foundations of Statistical Inference (Methuen, London, 1962).
Уилкс (Wilks S. S.)
Mathematical Statistics (John Wiley, New York, 1962). [Русский перевод: Математическая статистика, М., «Наука», 1967.]
Фукунага, Кессель (Fukunaga K., Kessell D. L.)
Estimation of classification error, *IEEE Trans. Comp.*, **C-20**, 1521—1527 (December 1971).
Хайлиман (Highleyman W. H.)
The design and analysis of pattern recognition experiments, *Bell System Technical Journal*, **41**, 723—744 (March 1962).
Хоул (Hoel P. G.)
Introduction of Mathematical Statistics (Fourth Edition, John Wiley, New York, 1971).
Хуге (Hughes G. F.)
On the mean accuracy of statistical pattern recognizers, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 55—63 (January 1968).

Чандрасекаран (Chandrasekaran B.)
Independence of measurements and the mean recognition accuracy, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-17**, 452—456 (July 1971).
Чандрасекаран, Харлн (Chandrasekaran B., Harley T. J., Jr.)
Comments 'On the mean accuracy of statistical pattern recognizers', *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-15**, 421—423 (May 1969).
Чен (Chen C. H.)
A theory of Bayesian learning systems, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-5**, 30—37 (January 1969).
Чин, Фу (Chien Y. T., Fu K. S.)
On Bayesian learning and stochastic approximation, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-3**, 28—38 (June 1967).

Задачи

1. Пусть величина x распределена по экспоненциальному закону:

$$p(x|\theta) = \begin{cases} \theta e^{-\theta x}, & x \geqslant 0, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

а) Изобразите зависимость $p(x|\theta)$ от x для постоянного значения параметра θ.
б) Изобразите зависимость $p(x|\theta)$ от θ, $\theta > 0$, для постоянного значения x.
в) Предположим, что независимо получено n выборок $x_1, \ldots, x_n$ в соответствии с $p(x|\theta)$. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для θ определяется выражением

$$\hat{\theta} = \frac{1}{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k}.$$

2. Пусть величина x распределена равномерно:

$$p(x|\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\theta}, & 0 \leqslant x \leqslant \theta, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

а) Изобразите зависимость $p(x_1|\theta)$ от θ для некоторого произвольного значения x_1.
б) Предположим, что независимо получено n выборок в соответствии с $p(x|\theta)$. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для θ есть $\max\limits_k x_k$.

3. Пусть выборки получаются последовательным независимым выбором состояний природы ω_i с неизвестной вероятностью $P(\omega_i)$. Пусть $z_{ik}=1$, если состояние природы для k-й выборки есть ω_i, и $z_{ik}=0$ в противном случае. Покажите, что

$$P(z_{i1}, \ldots, z_{in} | P(\omega_i)) = \prod_{k=1}^{n} P(\omega_i)^{z_{ik}} (1 - P(\omega_i))^{1-z_{ik}}$$

и что оценка по максимуму правдоподобия для $P(\omega_i)$ есть

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} z_{ik}.$$

4. Пусть $\mathbf{x}$ есть бинарный (0, 1) вектор с многомерным распределением Бернулли

$$P(\mathbf{x}\,|\,\theta)=\prod_{i=1}^{d}\theta_i^{x_i}\,(1-\theta_i)^{1-x_i},$$

где $\theta=(\theta_1, \ldots, \theta_d)^t$ — неизвестный параметрический вектор, а θ_i — вероятность того, что $x_i=1$. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для θ есть

$$\hat{\theta}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{x}_k.$$

5. Пусть $p(\mathbf{x}|\Sigma)\sim N(\mu, \Sigma)$, где μ известно, а Σ неизвестна. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для Σ определяется выражением

$$\hat{\Sigma}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mu)(\mathbf{x}_k-\mu)^t,$$

последовательно выполняя следующие действия:

а) Докажите матричное тождество $\mathbf{a}^tA\mathbf{a}=\mathrm{tr}\{A\mathbf{a}\mathbf{a}^t\}$, где след $\mathrm{tr}A$ есть сумма диагональных элементов матрицы A.

б) Покажите, что функцию правдоподобия можно записать в виде

$$p(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\,|\,\Sigma)=\frac{1}{(2\pi)^{nd/2}}\,|\,\Sigma^{-1}\,|^{n/2}\times$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,\Sigma^{-1}\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mu)(\mathbf{x}_k-\mu)^t\right].$$

в) Полагая, что $A=\Sigma^{-1}\hat{\Sigma}$ и $\lambda_1, \ldots, \lambda_d$ суть собственные значения матрицы A, покажите, что это приводит к выражению

$$p(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\,|\,\Sigma)=\frac{1}{(2\pi)^{nd/2}\,|\,\hat{\Sigma}\,|^{n/2}}(\lambda_1\ldots\lambda_d)^{n/2}\times$$
$$\times\exp\left[-\frac{n}{2}(\lambda_1+\ldots+\lambda_d)\right].$$

г) Завершите доказательство, показав, что максимум правдоподобия достигается при $\lambda_1=\ldots=\lambda_d=1$.

6. Предположим, что $p(\mathbf{x}|\mu_i, \Sigma, \omega_i)\sim N(\mu_i, \Sigma)$, где Σ — общая ковариационная матрица для всех c классов. Пусть n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ извлекаются обычным путем, и пусть $l_1, \ldots, l_n$ — их индексы, т. е. $l_k=i$, если состояние природы для $\mathbf{x}_k$ было ω_i.

а) Покажите, что

$$p(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n, l_1, \ldots, l_n\,|\,\mu_1, \ldots, \mu_c, \Sigma)=$$
$$=\frac{\prod_{k=1}^{n}P(\omega_{l_k})}{(2\pi)^{nd/2}\,|\,\Sigma\,|^{n/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k-\mu_{l_k})^t\,\Sigma^{-1}(\mathbf{x}_k-\mu_{l_k})\right].$$

б) Используя результаты для выборок из одного нормально распределенного семейства, покажите, что оценки по максимуму правдоподобия параметров μ_i и Σ

определяются выражениями

$$\hat{\mu}_i = \frac{\sum_{l_k=l} x_k}{\sum_{l_k=l} 1}$$

и

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \hat{\mu}_{l_k})(x_k - \hat{\mu}_{l_k})^t.$$

7. Рассмотрите задачу обучения при восстановлении среднего значения одномерного нормального распределения. Пусть $n_0 = \sigma^2/\sigma_0^2$ есть догматизм, и представим, что μ_0 образуется посредством усреднения n_0 вымышленных выборок x_k, $k = -n_0+1, \ldots, 0$. Покажите, что выражения (23) и (24) для μ_n и σ_n^2 дают

$$u_n = \frac{1}{n+n_0} \sum_{k=-n_0+1}^{n} x_k$$

и

$$\sigma_n^2 = \frac{\sigma^2}{n+n_0}.$$

Воспользуйтесь полученным результатом для интерпретации априорной плотности $p(\mu) \sim N(\mu_0, \sigma_0^2)$.

8. Докажите матричное тождество

$$(A^{-1} + B^{-1})^{-1} = A(A+B)^{-1}B = B(A+B)^{-1}A,$$

где A и B — невырожденные матрицы одного порядка. Воспользуйтесь полученным результатом, чтобы доказать, что соотношения (31) и (32) на самом деле следуют из (28) и (29).

9. Пусть выборочное среднее $\mathbf{m}_n$ и выборочная ковариационная матрица C_n для множества n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ определяются выражениями

$$\mathbf{m}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k$$

и

$$C_n = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (\mathbf{x}_k - \mathbf{m}_n)(\mathbf{x}_k - \mathbf{m}_n)^t.$$

Покажите, что влияние на эти величины добавления новой выборки $\mathbf{x}_{n+1}$ можно выразить рекуррентными формулами

$$\mathbf{m}_{n+1} = \mathbf{m}_n + \frac{1}{n+1}(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{m}_n)$$

и

$$C_{n+1} = \frac{n-1}{n} C_n + \frac{1}{n+1}(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{m}_n)(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{m}_n)^t.$$

10. Выражения из задачи 9 позволяют вводить поправки в оценки вариационных матриц. Однако нередко представляет интерес обратная ковариационная матрица, а ее обращение отнимает много времени. Доказав матричное тож-

дество

$$(A+\mathbf{x}\mathbf{x}^t)^{-1}=A^{-1}-\frac{A^{-1}\mathbf{x}\mathbf{x}^tA^{-1}}{1+\mathbf{x}^tA^{-1}\mathbf{x}}$$

и используя результаты, полученные в задаче 9, покажите, что

$$C_{n+1}^{-1}=\frac{n}{n-1}\left[C_n^{-1}-\frac{C_n^{-1}(\mathbf{x}_{n+1}-\mathbf{m}_n)(\mathbf{x}_{n+1}-\mathbf{m}_n)^tC_n^{-1}}{\frac{n^2-1}{n}+(\mathbf{x}_{n+1}-\mathbf{m}_n)^tC_n^{-1}(\mathbf{x}_{n+1}-\mathbf{m}_n)}\right].$$

11. В данной задаче ставится цель получить байесовский классификатор для случая многомерного распределения Бернулли. Как всегда, мы имеем дело с каждым классом в отдельности, истолковывая $P(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ как среднее $P(\mathbf{x}|\mathcal{X}_i, \omega_i)$. Пусть условная вероятность для данного класса определяется выражением

$$P(\mathbf{x}\,|\,\theta)=\prod_{i=1}^{d}\theta_i^{x_i}(1-\theta_i)^{1-x_i},$$

и пусть $\mathcal{X}$ есть множество n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, независимо извлекаемых в соответствии с этим вероятностным распределением.

а) Полагая, что $\mathbf{s}=(s_1, \ldots, s_d)^t$ есть сумма n выборок, покажите, что

$$P(\mathcal{X}\,|\,\theta)=\prod_{i=1}^{d}\theta_i^{s_i}(1-\theta_i)^{1-s_i}.$$

б) Полагая, что распределение θ равномерно, с учетом тождества

$$\int_0^1\theta^m(1-\theta)^n\,d\theta=\frac{m!n!}{(m+n+1)!}$$

покажите, что

$$p(\theta\,|\,\mathcal{X})=\prod_{i=1}^{d}\frac{(n+1)!}{s_i!\,(n-s_i)!}\theta_i^{s_i}(1-\theta_i)^{n-s_i}.$$

Изобразите эту плотность для случая $d=1$, $n=1$ и двух значений получаемых вероятностей для s_1.

в) Посредством интегрирования по θ произведения $P(\mathbf{x}|\theta)p(\theta|\mathcal{X})$ получите требуемую условную вероятность

$$P(\mathbf{x}\,|\,\mathcal{X})=\prod_{i=1}^{d}\left(\frac{s_i+1}{n+2}\right)^{x_i}\left(1-\frac{s_i+1}{n+2}\right)^{1-x_i}.$$

Если считать, что $P(\mathbf{x}|\mathcal{X})$ получается подстановкой оценки $\hat{\theta}$ в $P(\mathbf{x}|\theta)$ на место θ, то что является эффективной байесовской оценкой для θ?

12. Исходя из данных табл. 3.1, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для параметра θ при распределении Релея определяется выражением

$$\hat{\theta}=\frac{1}{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k^2}.$$

13. Исходя из данных табл. 3.1, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для параметра θ при распределении Максвелла определяется выра-

жением

$$\hat{\theta}=\frac{3/2}{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k^2}.$$

14. Исходя из данных табл. 3.1, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для параметра θ при полиномиальном распределении определяется выражением

$$\theta_i=\frac{s_i}{\sum_{j=1}^{d}s_j},$$

где вектор $\mathbf{s}=(s_1, \ldots, s_d)^t$ — среднее для n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$.

15. Рассмотрим случай двух классов, описанный в задаче 16 гл. 2, когда известно, что вероятность ошибки стремится к нулю при стремлении размерности d к бесконечности.

а) Предположим, что извлекается одна выборка $\mathbf{x}=(x_1, \ldots, x_d)^t$ из класса 1. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для p определяется выражением

$$\hat{p}=\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}x_i.$$

б) Опишите поведение $\hat{p}$ при стремлении d к бесконечности. Объясните, почему, если допустить беспредельное увеличение числа признаков, можно получить безошибочный классификатор даже при наличии только одной выборки всего из одного класса.

Глава 4

НЕПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

4.1. ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей главе мы рассматривали вопросы обучения с учителем, допуская, что вид основных плотностей распределения известен. Для большинства же случаев распознавания образов это допущение неверно. Очень редко распространенные параметрические формы соответствуют плотностям распределения, встречающимся на практике. В частности, все стандартные параметрические плотности распределения одномодальные (имеют один локальный максимум), в то время как во многих практических задачах приходится иметь дело с многомодальными плотностями распределения. В данной главе мы рассмотрим *непараметрические* процедуры, которыми можно пользоваться, не считая, что вид основных плотностей распределения известен.

Для распознавания образов интерес представляют несколько различных видов непараметрических методов. Один из методов состоит из процедур оценки плотности распределения $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ на основании выбранных образов. Если эти оценки удовлетворительны, то при проектировании оптимального классификатора ими можно заменить истинные значения плотности распределения. Другой метод состоит из процедур прямой оценки апостериорных вероятностей $P(\omega_j|\mathbf{x})$. Этот метод близок такому методу непараметрических решающих процедур, как правило «ближайшего соседа», в котором, обходя вероятностные оценки, сразу переходят к решающим функциям. И наконец, есть непараметрические процедуры, преобразующие пространство признаков так, чтобы в преобразованном пространстве можно было использовать параметрические методы. К этим методам дискриминантного анализа относится хорошо известный метод линейного дискриминанта Фишера, являющийся связующим звеном между параметрическими методами, описанными в гл. 3, и адаптивными методами гл. 5.

4.2. ОЦЕНКА ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Идеи, лежащие в основе методов оценки неизвестной плотности распределения вероятностей, довольно просты, хотя доказательство сходимости этих оценок сопряжено с большими трудностями. Большинство фундаментальных методов опирается на то, что вероятность

P попадания вектора $\mathbf{x}$ в область $\mathcal{R}$ задается выражением

$$P = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}'. \tag{1}$$

Таким образом, P есть сглаженный, или усредненный, вариант плотности распределения $p(\mathbf{x})$, и можно оценить это сглаженное значение p посредством оценки вероятности P. Предположим, что n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ берутся независимо друг от друга в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x})$. Очевидно, что вероятность попадания k из n выборок в $\mathcal{R}$ задается биномиальным законом

$$P_k = \binom{n}{k} P^k (1-P)^{n-k}$$

и ожидаемой величиной k будет

$$E[k] = nP. \tag{2}$$

Более того, это биномиальное распределение для k имеет довольно резко выраженные максимумы около среднего значения, поэтому мы считаем, что отношение k/n будет хорошей оценкой вероятности P, а следовательно, и сглаженной плотности распределения. Если теперь мы допустим, что $p(\mathbf{x})$ непрерывна и область $\mathcal{R}$ настолько мала, что p в ее пределах меняется незначительно, то можем написать

$$\int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \approx p(\mathbf{x})\, V, \tag{3}$$

где $\mathbf{x}$ — это точка внутри $\mathcal{R}$ и V — объем $\mathcal{R}$. Объединяя уравнения (1) — (3), получаем следующую очевидную оценку для $p(\mathbf{x})$:

$$p(\mathbf{x}) \approx \frac{k/n}{V}. \tag{4}$$

Остается решить несколько проблем практического и теоретического плана. Если мы фиксируем объем V и делаем все больше и больше выборок, отношение k/n сойдется (по вероятности) требуемым образом, но при этом мы получаем только оценку пространственно усредненной величины $p(\mathbf{x})$:

$$\frac{P}{V} = \frac{\int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}'}{\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{x}'}.$$

Если мы хотим получить $p(\mathbf{x})$, а не усредненный ее вариант, необходимо устремить V к нулю. Однако если зафиксировать количество n выборок и позволить V стремиться к нулю, то область в конечном

счете станет настолько малой, что не будет содержать в себе никаких выборок, и наша оценка $p(\mathbf{x}) \approx 0$ будет бесполезной [1]).

С практической точки зрения количество выборок всегда ограничено, так что нельзя позволить объему V становиться бесконечно малым. Если приходится пользоваться таким видом оценки, то нужно допускать определенную дисперсию отношения k/n и определенное усреднение плотности распределения $p(\mathbf{x})$.

С теоретической точки зрения интересно, как можно обойти эти ограничения при наличии неограниченного количества выборок. Предположим, что мы пользуемся следующей процедурой. Для оценки плотности распределения $\mathbf{x}$ мы образуем последовательность областей $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \ldots$, содержащих $\mathbf{x}$. Первая область будет соответствовать одной выборке, вторая — двум и т. д. Пусть V_n будет объемом $\mathcal{R}_n$, k_n — количеством выборок, попадающих в $\mathcal{R}_n$, а $p_n(\mathbf{x})$ — n-й оценкой $p(\mathbf{x})$:

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{k_n/n}{V_n}. \tag{5}$$

Если $p_n(\mathbf{x})$ должна сойтись к $p(\mathbf{x})$, то, по-видимому, нужны три условия:

1) $\lim_{n\to\infty} V_n = 0$,
2) $\lim_{n\to\infty} k_n = \infty$,
3) $\lim_{n\to\infty} k_n/n = 0$.

Первое условие обеспечивает сходимость пространственно усредненного P/V к $p(\mathbf{x})$ при однородном сокращении областей и при непрерывности p в $\mathbf{x}$. Второе условие, имеющее смысл только при $p(\mathbf{x}) \neq 0$, обеспечивает сходимость (по вероятности) отношения частот к вероятности P.

Совершенно ясно, что третье условие необходимо, если $p_n(\mathbf{x})$, заданная соотношением (5), вообще должна сойтись. Это условие говорит также о том, что, хотя в конечном счете в небольшую область $\mathcal{R}_n$ попадает огромное количество выборок, оно составит лишь незначительно малую часть всего количества выборок.

Существуют два общих способа получения последовательностей областей, удовлетворяющих этим условиям. Первый способ заключается в сжатии начальной области за счет определения объема V_n как некоторой функции от n, такой, чтобы $V_n = 1/\sqrt{n}$. Затем следует показать, что случайные величины k_n и k_n/n ведут себя правильно или, имея в виду существо дела, что $p_n(\mathbf{x})$ сходится к $p(\mathbf{x})$. В этом заключается метод парзеновского окна, рассматриваемый в следующем разделе. Во втором методе k_n определяется как некоторая функция

[1]) Если случайно одна или более выборок совпадут с $\mathbf{x}$, то наша оценка дает бесконечно большое значение, что в равной мере бесполезно.

от n: $k_n=\sqrt{n}$. Здесь объем V_n увеличивается до тех пор, пока не охватит k_n «соседей» $\mathbf{x}$. Это метод оценки по k_n ближайшим соседям. Оба эти метода действительно обеспечивают сходимость, хотя трудно сказать что-либо определенное об их поведении при конечном числе выборок.

4.3. ПАРЗЕНОВСКИЕ ОКНА

4.3.1. ОБЩИЕ СООБРАЖЕНИЯ

Знакомство с методом оценки плотностей распределения с помощью парзеновского окна можно начать с временного предположения о том, что область $\mathcal{R}_n$ является d-мерным гиперкубом. Если h_n есть длина ребра этого гиперкуба, то его объем задается как

$$V_n=h_n^d. \tag{6}$$

Аналитическое выражение для k_n— количества выборок, попадающих в этот гиперкуб,— можем получить, определяя следующую *функцию окна:*

$$\varphi(\mathbf{u})=\begin{cases} 1, \text{ если } |u_j|\leqslant 1/2, \ j=1, \ldots, d, \\ 0 \text{ в противном случае.} \end{cases} \tag{7}$$

Таким образом, $\varphi(\mathbf{u})$ определяет единичный гиперкуб с центром в начале координат. Отсюда следует, что $\varphi((\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)/h_n)$ равняется единице, если $\mathbf{x}_i$ находится в гиперкубе объема V_n с центром в $\mathbf{x}$, или нулю в любом другом случае. Следовательно, количество выборок в этом гиперкубе задается выражением

$$k_n=\sum_{i=1}^{n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right).$$

Подставляя его в (5), получаем оценку

$$p_n(\mathbf{x})=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{V_n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right). \tag{8}$$

Это соотношение предполагает более общий подход к оценке плотности распределения. Не ограничиваясь функцией окна гиперкуба, данной формулой (7), допускаем более общий класс функций окна. Тогда соотношение (8) выражает нашу оценку $p(\mathbf{x})$ как среднее значение функций от $\mathbf{x}$ и выборок $\mathbf{x}_i$. По существу, функция окна используется для *интерполяции*, причем каждая выборка влияет на оценку в зависимости от ее расстояния до $\mathbf{x}$.

Хотелось бы, чтобы оценка $p_n(\mathbf{x})$ была законной плотностью распределения, т. е. неотрицательной, с интегралом, равным единице. Это можно гарантировать, требуя, чтобы функция окна была за-

конной плотностью распределения. Точнее, если мы потребуем, чтобы

$$\varphi(\mathbf{u}) \geqslant 0 \tag{9}$$

и

$$\int \varphi(\mathbf{u})\, d\mathbf{u} = 1, \tag{10}$$

и если мы сохраняем отношение $V_n = h_n^d$, то отсюда сразу же следует что и $p_n(\mathbf{x})$ также удовлетворяет этим условиям.

Рассмотрим, какое влияние оказывает на $p_n(\mathbf{x})$ *ширина окна* h_n. Если мы определяем функцию $\delta_n(\mathbf{x})$ как

$$\delta_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x}}{h_n}\right), \tag{11}$$

то можем записать $p_n(\mathbf{x})$ в виде среднего

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \tag{12}$$

Поскольку $V_n = h_n^d$, то h_n влияет как на амплитуду, так и на ширину окна $\delta_n(\mathbf{x})$. Если h_n очень велика, то амплитуда у δ_n мала, и $\mathbf{x}$ должно находиться достаточно далеко от $\mathbf{x}_i$, пока $\delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ не станет значительно отличаться от $\delta_n(\mathbf{0})$. В этом случае $p_n(\mathbf{x})$ есть наложение n широких, медленно меняющихся функций и служит очень сглаженной «несфокусированной» оценкой $p(\mathbf{x})$. С другой стороны, если h_n очень мала, то максимальное значение $\delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ велико и находится вблизи от $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$. В этом случае $p_n(\mathbf{x})$ есть наложение n резких выбросов с центрами в выборках и является ошибочной «зашумленной» оценкой функции $p(\mathbf{x})$. Для любого значения h_n справедливо выражение

$$\int \delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\, d\mathbf{x} = \int \frac{1}{V_n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right) d\mathbf{x} = \int \varphi(\mathbf{u})\, d\mathbf{u} = 1. \tag{13}$$

Таким образом, по мере устремления h_n к нулю $\delta_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ стремится к дельта-функции Дирака, центрированной в $\mathbf{x}_i$, и $p_n(\mathbf{x})$ стремится к наложению дельта-функций, центрированных в выборках.

Ясно, что выбор значения h_n (или V_n) сильно сказывается на $p_n(\mathbf{x})$. Если объем V_n слишком велик, оценка будет плохой из-за слишком малой разрешающей способности. Если V_n слишком мал, оценка будет плохой в результате слишком большого статистического разброса. При ограниченном количестве выборок самое лучшее решение — пойти на приемлемый компромисс. При неограниченном же количестве выборок можно позволить V_n медленно стремиться к нулю по мере увеличения n и заставить $p_n(\infty)$ сойтись к неизвестной плотности распределения $p(\mathbf{x})$.

Говоря о сходимости, мы должны сознавать, что речь идет о сходимости последовательности случайных величин, так как для любого фиксированного $\mathbf{x}$ значение $p_n(\mathbf{x})$ зависит от значений слу-

чайных выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$. Таким образом, $p_n(\mathbf{x})$ имеет некоторое среднее $\bar{p}_n(\mathbf{x})$ и некоторую дисперсию $\sigma_n^2(\mathbf{x})$. Будем говорить, что оценка $p_n(\mathbf{x})$ сходится к $p(\mathbf{x})$, если [1])

$$\lim_{n\to\infty} \bar{p}_n(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}) \tag{14}$$

и

$$\lim_{n\to\infty} \sigma_n^2(\mathbf{x}) = 0. \tag{15}$$

Чтобы доказать сходимость, нужно наложить условия на неизвестную плотность распределения $p(\mathbf{x})$, функцию окна $\varphi(\mathbf{u})$ и ширину окна h_n. Обычно требуется, чтобы p была непрерывной в $\mathbf{x}$ и чтобы выполнялись условия (9) и (10). Можно доказать, что сходимость обеспечивается при следующих дополнительных условиях:

$$\sup_{\mathbf{u}} \varphi(\mathbf{u}) < \infty, \tag{16}$$

$$\lim_{\|\mathbf{u}\|\to\infty} \varphi(\mathbf{u}) \prod_{i=1}^{d} u_i = 0, \tag{17}$$

$$\lim_{n\to\infty} V_n = 0, \tag{18}$$

$$\lim_{n\to\infty} nV_n = \infty. \tag{19}$$

Выражения (16) и (17) способствуют хорошему поведению φ, и этим условиям удовлетворяет большинство плотностей распределения, которые можно взять для функций окна. Уравнения (18) и (19) говорят о том, что объем V_n должен стремиться к нулю, но со скоростью, меньшей чем $1/n$. Рассмотрим теперь, почему эти условия — основные условия, обеспечивающие сходимость.

4.3.2. СХОДИМОСТЬ СРЕДНЕГО ЗНАЧЕНИЯ

Сначала рассмотрим $\bar{p}_n(\mathbf{x})$ — среднее значение $p_n(\mathbf{x})$. Поскольку выборки $\mathbf{x}_i$ распределены равномерно в соответствии с (неизвестной) плотностью распределения $p(\mathbf{x})$, имеем

$$\begin{aligned}\bar{p}_n(\mathbf{x}) = \mathcal{E}[p_n(\mathbf{x})] &= \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} E\left[\frac{1}{V_n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right)\right] = \\ &= \int \frac{1}{V_n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{v}}{h_n}\right) p(\mathbf{v})\, d\mathbf{v} = \\ &= \int \delta_n(\mathbf{x}-\mathbf{v})\, p(\mathbf{v})\, d\mathbf{v}. \end{aligned} \tag{20}$$

[1]) Такой тип сходимости называется *среднеквадратичной сходимостью*. Описание видов сходимости последовательности произвольных переменных см. в книге E. Parzen, Modern Probability Theory and its Applications, Chapter 10 (John Wiley, New York, 1960).

Это уравнение показывает, что ожидаемое значение оценки есть усредненное значение неизвестной плотности распределения, *свертка* неизвестной плотности распределения и функции окна. Таким образом, $\bar{p}_n(\mathbf{x})$ является сглаженным вариантом для $p(\mathbf{x})$, видимым через усредняющее окно. Но с устремлением V_n к нулю $\delta_n(\mathbf{x}-\mathbf{v})$ стремится к дельта-функции с центром в $\mathbf{x}$. Так что если p непрерывна в $\mathbf{x}$, то уравнение (18) гарантирует, что $\bar{p}_n(\mathbf{x})$ будет приближаться к $p(\mathbf{x})$ по мере устремления n к бесконечности [1]).

4.3.3. СХОДИМОСТЬ ДИСПЕРСИИ

Уравнение (20) показывает, что для того, чтобы заставить $\bar{p}_n(\mathbf{x})$ устремиться к $p(\mathbf{x})$, не нужно иметь бесконечное число выборок; при любом n достаточно только устремить V_n к нулю. Конечно, для конкретного множества n выборок получающаяся оценка, имеющая всплески, будет бесполезной. Этот факт подчеркивает необходимость рассмотрения дисперсии оценки. Поскольку $p_n(\mathbf{x})$ является суммой функций статистически независимых случайных величин, ее дисперсия является суммой дисперсий отдельных членов, и отсюда имеем

$$\begin{aligned}\sigma_n^2(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^{n} E\left[\left\{\frac{1}{nV_n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right)-\frac{1}{n}\bar{p}_n(\mathbf{x})\right\}^2\right] = \\ &= nE\left[\frac{1}{n^2V_n^2}\varphi^2\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right)\right]-\frac{1}{n}\bar{p}_n^2(\mathbf{x}) = \\ &= \frac{1}{nV_n}\int\frac{1}{V_n}\varphi^2\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{v}}{h_n}\right)p(\mathbf{v})\,d\mathbf{v}-\frac{1}{n}\bar{p}_n^2(\mathbf{x}). \qquad (21)\end{aligned}$$

Опуская второй член, ограничивающий φ, и используя (20), получаем

$$\sigma_n^2(\mathbf{x}) \leqslant \frac{\sup(\varphi)\,\bar{p}_n(\mathbf{x})}{nV_n}. \qquad (22)$$

Ясно, что для получения небольшой дисперсии нам нужно большое, а не малое значение V_n. Однако, поскольку числитель остается конечным при стремлении n к бесконечности, мы можем позволить V_n стремиться к нулю и все же получать нулевую дисперсию при условии, что nV_n стремится к бесконечности. Например, мы можем взять $V_n=V_1/\sqrt{n}$, или $V_1/\log n$, или любую другую функцию, удовлетворяющую соотношениям (18) и (19).

Это основной теоретический вывод. Но, к сожалению, он ничего не говорит о том, как выбирать φ и V_n, чтобы получить хорошие ре-

[1]) Это не строгий аргумент, но он интуитивно ясен и вполне разумен. Более глубокий анализ показывает, что возникает затруднение, если неизвестная плотность распределения неограничена, как это бывает, когда $p(\mathbf{x})$ содержит дельта-функции. Условие, добавляемое соотношением (17), устраняет это затруднение.

зультаты в случае с конечным числом выборок. Действительно, если у нас не будет другой информации о $p(x)$, помимо той, что она непрерывна, у нас не будет никакого основания для оптимизации результатов при конечном числе выборок.

4.3.4. ДВА ПРИМЕРА

Интересно проследить, как метод парзеновского окна проявляется на простых примерах. Рассмотрим сначала случай, где $p(x)$ является одномерной нормальной плотностью распределения с нулевым средним значением и дисперсией, равной единице. Пусть функция окна будет иметь тот же вид:

$$\varphi(u)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}u^2\right].$$

И наконец, пусть $h_n=h_1\sqrt{n}$, где h_1 — параметр, находящийся в нашем распоряжении. Таким образом, $p_n(x)$ есть среднее нормальных плотностей распределения, центрированных в выборках:

$$p_n(x)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{h_n}\varphi\left(\frac{x-x_i}{h_n}\right).$$

Нетрудно из соотношений (20) и (21) найти выражения среднего значения и дисперсии для $p_n(x)$, но еще интереснее увидеть численные результаты. На рис. 4.1 показаны результаты, полученные при вычислении $p_n(x)$ с помощью конкретно выбранного множества нормально распределенных случайных выборок. Эти результаты зависят от n и h_1. Для $n=1$ функция $p_n(x)$ будет просто единственным холмом гауссовского распределения с центром в первой выборке. Для $n=16$ и $h_1=1/4$ влияние отдельных выборок ясно различимо, а для $h_1=1$ и $h_1=4$ — нет. По мере увеличения n способность p_n отражать особенности p возрастает. При этом p_n оказывается более чувствительной к локальным нерегулярностям выборок, когда n велико, хотя мы уверены, что p_n будет сходиться к сглаженной нормальной кривой по мере устремления n к бесконечности. Ясно, что нельзя судить по одному внешнему виду и что для получения точной оценки требуется много выборок.

В качестве другого примера пусть $\varphi(u)$ и h_n будут такими же, а неизвестная плотность распределения пусть будет смесью двух однородных плотностей

$$p(x)=\begin{cases}1, & -2{,}5<x<-2,\\ 0{,}25, & 0<x<2,\\ 0 & \text{в противном случае.}\end{cases}$$

На рис. 4.2 показано поведение оценок этой плотности, полученных методом парзеновского окна.

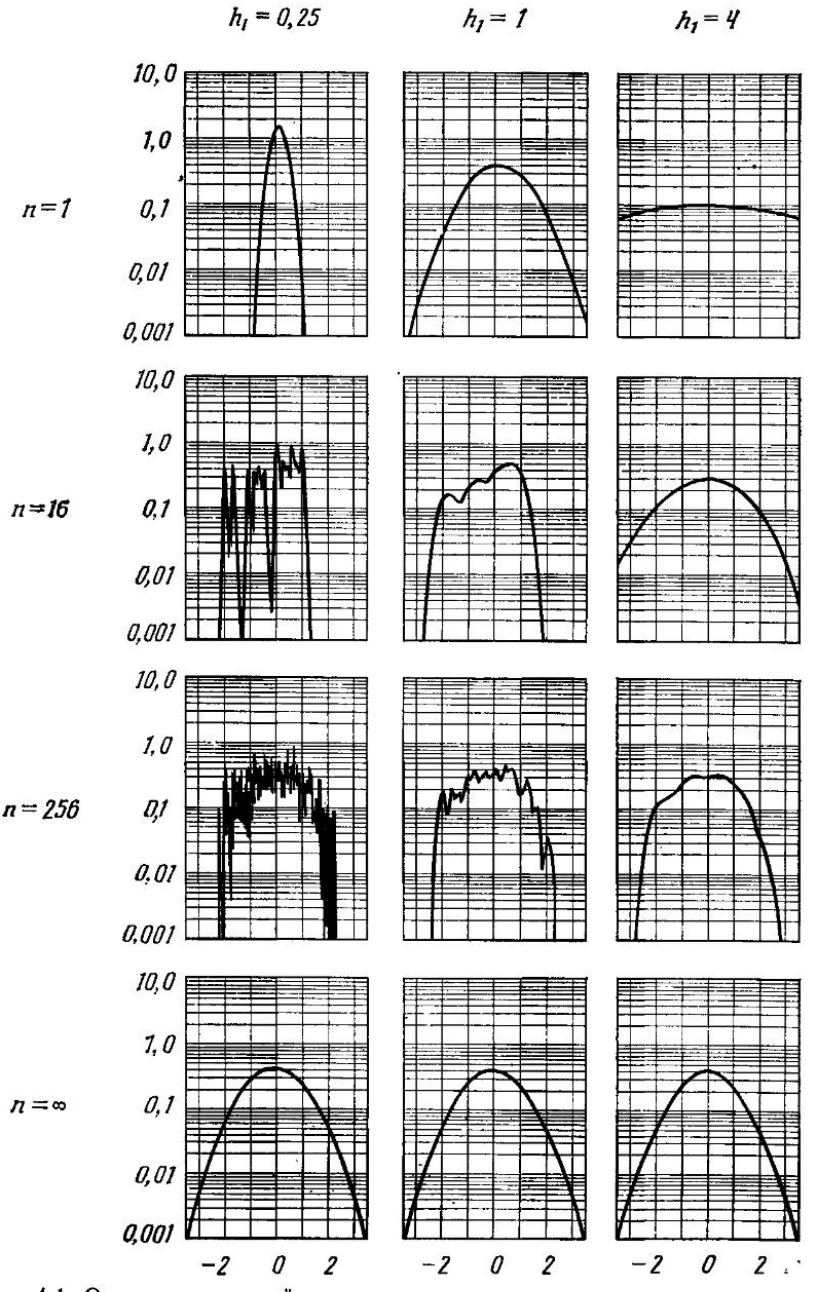


Рис. 4.1. Оценка нормальной плотности распределения методом парзеновского окна.

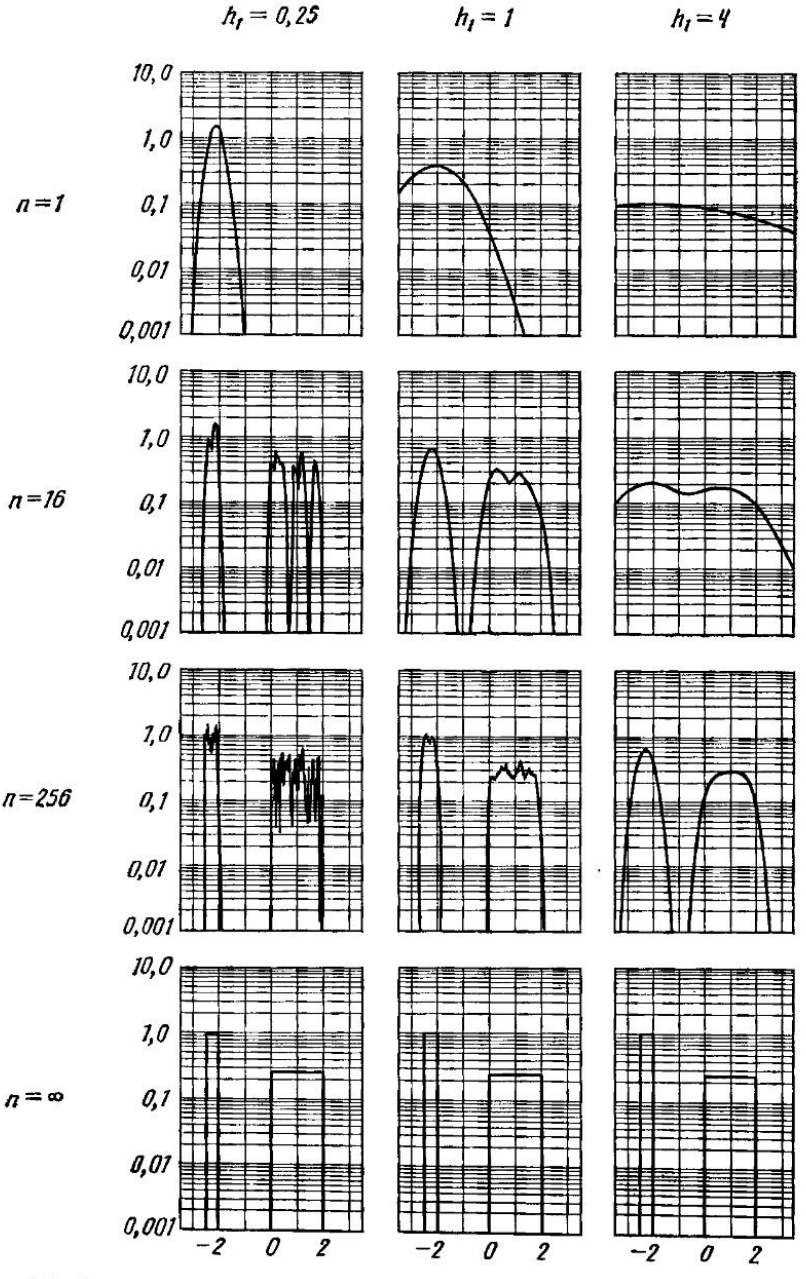


Рис. 4.2. Оценка бимодальной плотности распределения методом парзеновского окна.

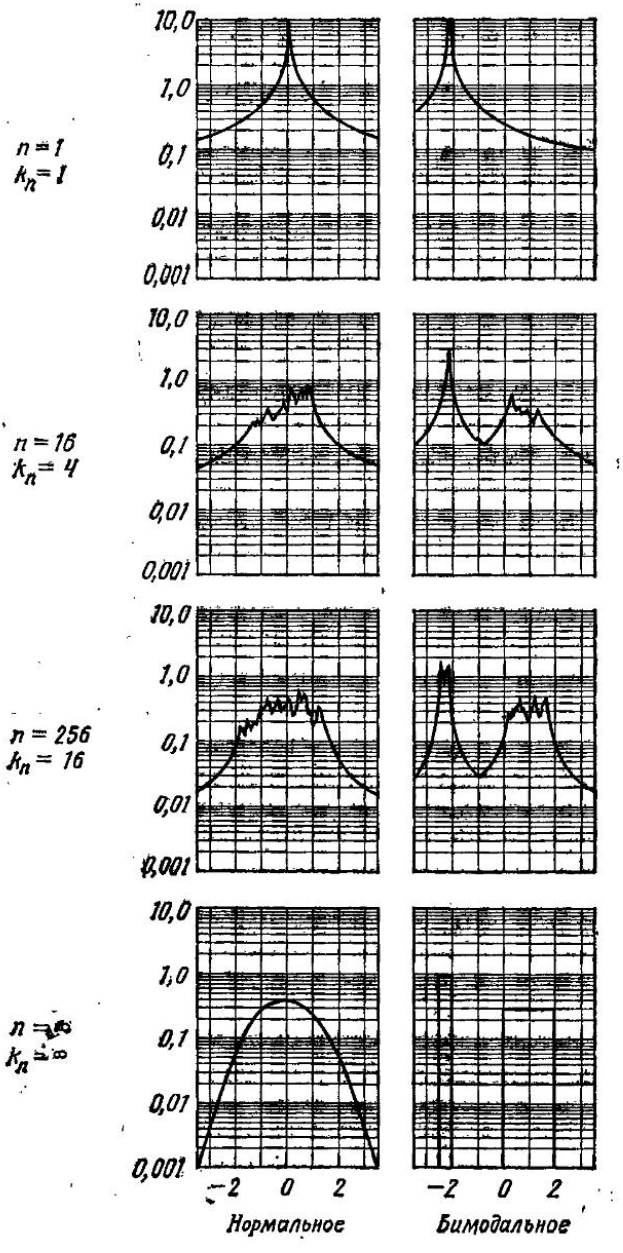
Как и прежде, случай с $n=1$ говорит больше о функции окна, чем о неизвестной плотности распределения. Для $n=16$ ни одна из оценок не годится, а вот для $n=256$ и $h_1=1$ результаты уже кажутся приемлемыми.

Эти примеры показывают некоторые достоинства и некоторую ограниченность непараметрических методов. Достоинства заключаются в их общности. Одна и та же процедура использовалась для унимодального нормального и бимодального смешанного случаев. При достаточном количестве выборок мы уверены в сходимости к сколь угодно сложной неизвестной плотности распределения. С другой стороны, может потребоваться очень большое количество выборок, намного превышающее то количество, которое нам потребовалось бы, если бы мы знали вид неизвестной плотности распределения. Нет почти никаких способов уменьшения объема данных, поэтому потребности во времени вычисления и памяти слишком велики. Более того, потребность большего количества выборок растет экспоненциально с увеличением размерности пространства признаков. Этот недостаток непараметрических процедур, связанный с явлением, которое Беллман назвал «проклятием размерности», намного ограничивает их практическую применимость.

4.4. ОЦЕНКА МЕТОДОМ k_n БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Одна из проблем, с которой сталкиваются при использовании метода парзеновского окна, заключается в выборе последовательности объемов ячеек $V_1, V_2, \ldots$. Например, если мы берем $V_n=V_1/\sqrt{n}$, то результаты для любого конечного n будут очень чувствительны к выбору начального объема V_1. Если V_1 слишком мал, большинство объемов будут пустыми и оценка $p_n(\mathbf{x})$ будет довольно ошибочной. С другой стороны, если V_1 слишком велик, то из-за усреднения по объему ячейки могут быть потеряны важные пространственные отклонения от $p(\mathbf{x})$. Кроме того, вполне может случиться, что объем ячейки, уместный для одного значения $\mathbf{x}$, может совершенно не годиться для других случаев.

Один из возможных способов решения этой проблемы — сделать объем ячейки функцией данных, а не количества выборок. Например, чтобы оценить $p(\mathbf{x})$ на основании n выборок, можно центрировать ячейку вокруг $\mathbf{x}$ и позволить ей расти до тех пор, пока она не вместит k_n выборок, где k_n есть некая определенная функция от n. Эти выборки будут k_n ближайшими соседями $\mathbf{x}$. Если плотность распределения вблизи $\mathbf{x}$ высокая, то ячейка будет относительно небольшой, что приводит к хорошему разрешению. Если плотность распределения невысокая, то ячейка возрастает, но рост приостанавливается вскоре после ее вступления в области более высокой плот-



i. Оценки двух плотностей распределения, полученные методом жайших соседей.

ности распределения. В любом случае, если мы берем

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{k_n/n}{V_n}, \tag{5}$$

мы хотим, чтобы k_n стремилось к бесконечности при стремлении n к бесконечности, так как это гарантирует, что k_n/n будет хорошей оценкой вероятности попадания точки в ячейку объема V_n. Однако мы хотим также, чтобы k_n росло достаточно медленно для того, чтобы размер ячейки, необходимый для вмещения k_n выборок, сжался до нуля. Таким образом, из формулы (5) видно, что отношение k_n/n должно стремиться к нулю. Хотя мы не приводим доказательств, можно показать, что условия $\lim_{n\to\infty} k_n = \infty$ и $\lim_{n\to\infty} k_n/n = 0$ являются необходимыми и достаточными для сходимости $p_n(\mathbf{x})$ и $p(\mathbf{x})$ по вероятности во всех точках, где плотность p непрерывна. Если взять $k_n = \sqrt{n}$ и допустить, что $p_n(\mathbf{x})$ является хорошей аппроксимацией $p(\mathbf{x})$, то из соотношения (5) следует, что $V_n \approx 1/(\sqrt{n}\, p(\mathbf{x}))$. Таким образом, V_n опять имеет вид $V_1/\sqrt{n}$, но начальный объем V_1 определяется характером данных, а не каким-либо нашим произвольным выбором.

Полезно сравнить этот метод с методом парзеновского окна на тех же данных, что были использованы в предыдущих примерах. С $n = 1$ и $k_n = \sqrt{n} = 1$ оценка становится

$$p_n(x) = \frac{1}{2|x - x_1|}.$$

Ясно, что это плохая оценка для $p(x)$, поскольку ее интеграл расходится. Как показано на рис. 4.3, оценка становится значительно лучше по мере увеличения n несмотря на то, что интеграл оценки всегда остается бесконечным. Этот неприятный факт компенсируется тем, что $p_n(x)$ никогда не сведется к нулю просто потому, что в некоторую произвольную ячейку или окно не попадают никакие выборки. Хотя эта компенсация может показаться скудной, в пространствах более высокой размерности она приобретает бо́льшую ценность.

Как и в методе парзеновского окна, мы можем получить семейство оценок, принимая $k_n = k_1\sqrt{n}$ и выбирая различные значения для k_1. Однако при отсутствии какой-либо дополнительной информации любой выбор одинаково хорош, и мы можем быть уверены лишь в том, что результаты будут асимптотически правильными.

4.5. ОЦЕНКА АПОСТЕРИОРНЫХ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Рассмотренные в предыдущих разделах методы можно использовать для оценки апостериорных вероятностей $P(\omega_i|\mathbf{x})$ на основании n помеченных выборок, пользуясь выборками для оценки соответствующих плотностей распределения. Предположим, что мы

размещаем ячейку объема V вокруг $\mathbf{x}$ и захватываем k выборок, k_i из которых оказываются помеченными ω_i. Тогда очевидной оценкой совместной вероятности $p(\mathbf{x}, \omega_i)$ будет

$$p_n(\mathbf{x}, \omega_i) = \frac{k_i/n}{V}.$$

Таким образом, приемлемой оценкой для $P(\omega_i|\mathbf{x})$ будет

$$P_n(\omega_i|\mathbf{x}) = \frac{p_n(\mathbf{x}, \omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p_n(\mathbf{x}, \omega_j)} = \frac{k_i}{k}.$$

Иначе говоря, оценка апостериорной вероятности того, что состояние природы есть ω_i, является просто долей выборок в ячейке, помеченных ω_i.

Чтобы свести уровень ошибки к минимуму, мы выбираем класс, наиболее часто представляемый в ячейке. Если имеется достаточное количество выборок и если ячейка достаточно мала, то можно показать, что результаты будут в этом случае близки к наилучшим.

Если дело доходит до выбора размера ячейки, то можно воспользоваться или методом парзеновского окна, или методом k_n ближайших соседей. В первом случае V_n будет некоторой определенной функцией от n, а именно $V_n = 1/\sqrt{n}$. Во втором случае V_n будет расширяться до тех пор, пока не вместит некоторое определенное число выборок, а именно $k = \sqrt{n}$. В любом случае по мере устремления n к бесконечности в бесконечно малую ячейку будет попадать бесконечное число выборок. Тот факт, что объем ячейки может стать бесконечно малым и все же будет содержать бесконечно большое число выборок, позволяет нам изучать неизвестные вероятности с определенной точностью и, таким образом, постепенно добиваться оптимальных результатов. Довольно интересно, как мы увидим далее, что можно получать сравнимые результаты, основывая наше решение только на метке единственного ближайшего соседа величины $\mathbf{x}$.

4.6. ПРАВИЛО БЛИЖАЙШЕГО СОСЕДА

4.6.1. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Пусть $\mathcal{X}^n = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$ будет множеством n помеченных выборок, и пусть $\mathbf{x}'_n \in \mathcal{X}^n$ будет выборкой, ближайшей к $\mathbf{x}$. Тогда *правило ближайшего соседа* для классификации $\mathbf{x}$ заключается в том, что $\mathbf{x}$ присваивается метка, ассоциированная с $\mathbf{x}'_n$. Правило ближайшего соседа является почти оптимальной процедурой; его применение обычно приводит к уровню ошибки, превышающему минимально возможный байесовский. Как мы увидим, однако, при неограниченном количестве выборок уровень ошибки никода не будет хуже байесовского более чем в два раза.

Прежде чем вдаваться в детали, давайте попытаемся эвристически разобраться в том, почему правило ближайшего соседа дает такие хорошие результаты. Для начала отметим, что метка θ'_n, ассоциированная с ближайшим соседом, является случайной величиной, а вероятность того, что $\theta'_n = \omega_i$, есть просто апостериорная вероятность $P(\omega_i|\mathbf{x}'_n)$. Когда количество выборок очень велико, следует допустить, что $\mathbf{x}'_n$ расположено достаточно близко к $\mathbf{x}$, чтобы $P(\omega_i|\mathbf{x}'_n) \approx P(\omega_i|\mathbf{x})$. В этом случае можем рассматривать правило ближайшего соседа как рандомизированное решающее правило, которое классифицирует $\mathbf{x}$ путем выбора класса ω_i с вероятностью $P(\omega_i|\mathbf{x})$. Поскольку это точная вероятность того, что природа находится в состоянии ω_i, значит, правило ближайшего соседа эффективно согласует вероятности с реальностью.

Если мы определяем $\omega_m(\mathbf{x})$ как

$$P(\omega_m|\mathbf{x}) = \max_i P(\omega_i|\mathbf{x}), \tag{23}$$

то байесовское решающее правило всегда выбирает ω_m. Когда вероятность $P(\omega_m|\mathbf{x})$ близка к единице, выбор с помощью правила ближайшего соседа почти всегда будет таким же, как и байесовский, это значит, что когда минимальная вероятность ошибки мала, то вероятность ошибки правила ближайшего соседа также мала. Когда $P(\omega_m|\mathbf{x})$ близка к $1/c$, так что все классы одинаково правдоподобны, то выборы, сделанные с помощью этих двух правил, редко бывают одинаковыми, но вероятность ошибки в обоих случаях составляет приблизительно $1-1/c$. Не исключая необходимости в более тщательном анализе, эти замечания позволяют меньше удивляться хорошим результатам правила ближайшего соседа.

Наш анализ поведения правила ближайшего соседа будет направлен на получение условной средней вероятности ошибки $P(e|\mathbf{x})$ при большом количестве выборок, где усреднение производится по выборкам. Безусловная средняя вероятность ошибки будет найдена путем усреднения $P(e|\mathbf{x})$ по всем $\mathbf{x}$:

$$P(e) = \int P(e|\mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}. \tag{24}$$

Заметим, что решающее правило Байеса минимизирует $P(e)$ путем минимизации $P(e|\mathbf{x})$ для каждого $\mathbf{x}$.

Если $P^*(e|\mathbf{x})$ является минимально возможным значением $P(e|\mathbf{x})$, а P^* — минимально возможным значением $P(e)$, то

$$P^*(e|\mathbf{x}) = 1 - P(\omega_m|\mathbf{x}) \tag{25}$$

и

$$P^* = \int P^*(e|\mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}. \tag{26}$$

4.6.2. СХОДИМОСТЬ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДА БЛИЖАЙШЕГО СОСЕДА

Теперь мы хотим оценить среднюю вероятность ошибки для правила ближайшего соседа. В частности, если $P_n(e)$ есть уровень ошибки с n выборками и если

$$P = \lim_{n\to\infty} P_n(e), \tag{27}$$

то мы хотим показать, что

$$P^* \leqslant P \leqslant P^*\left(2 - \frac{c}{c-1}P^*\right). \tag{28}$$

Начнем с замечания, что при использовании правила ближайшего соседа с конкретным множеством n выборок результирующий уровень ошибки будет зависеть от случайных характеристик выборок. В частности, если для классификации $\mathbf{x}$ используются различные множества n выборок, то для ближайшего соседа вектора $\mathbf{x}$ будут получены различные векторы $\mathbf{x}'_n$. Так как решающее правило зависит от ближайшего соседа, мы имеем условную вероятность ошибки $P_n(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}'_n)$, которая зависит как от $\mathbf{x}$, так и от $\mathbf{x}'_n$. Усредняя по $\mathbf{x}'_n$, получаем

$$P_n(e|\mathbf{x}) = \int P_n(e|\mathbf{x}, \mathbf{x}'_n)\, p(\mathbf{x}'_n|\mathbf{x})\, d\mathbf{x}'_n. \tag{29}$$

Обычно очень трудно получить точное выражение для условной плотности распределения $p(\mathbf{x}'_n|\mathbf{x})$. Однако, поскольку $\mathbf{x}'_n$ по определению является ближайшим соседом $\mathbf{x}$, мы ожидаем, что эта плотность будет очень большой в непосредственной близости от $\mathbf{x}$ и очень малой во всех других случаях. Более того, мы ожидаем, что по мере устремления n к бесконечности $p(\mathbf{x}'_n|\mathbf{x})$ будет стремиться к дельта-функции с центром в $\mathbf{x}$, что делает оценку, задаваемую (29), тривиальной. Для того чтобы показать, что это действительно так, мы должны допустить, что плотность p для заданного $\mathbf{x}$ непрерывна и не равна нулю. При таких условиях вероятность попадания любой выборки в гиперсферу S с центром в $\mathbf{x}$ есть некое положительное число

$$P_S = \int_{\mathbf{x}'\in S} p(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}'.$$

Таким образом, вероятность попадания всех n независимо взятых выборок за пределы этой гиперсферы будет $(1-P_S)^n$, стремящейся к нулю по мере устремления n к бесконечности. Итак, $\mathbf{x}'_n$ сходится к $\mathbf{x}$ по вероятности и $p(\mathbf{x}'_n|\mathbf{x})$ приближается к дельта-функции, как и ожидалось. Вообще говоря, применяя методы теории ме-

ры, можно получить более убедительные (и более строгие) доказательства сходимости $\mathbf{x}'_n$ к $\mathbf{x}$, но для наших целей достаточно полученного результата.

4.6.3. УРОВЕНЬ ОШИБКИ ДЛЯ ПРАВИЛА БЛИЖАЙШЕГО СОСЕДА

Обратимся теперь к вычислению условной вероятности ошибки $P_n(e \mid \mathbf{x}, \mathbf{x}'_n)$. Чтобы избежать недоразумений, необходимо поставить задачу более тщательно, чем это делалось до сих пор. Когда мы говорим, что у нас имеется n независимо сделанных помеченных выборок, то мы имеем в виду n пар случайных переменных $(\mathbf{x}_1, \theta_1), (\mathbf{x}_2, \theta_2), \ldots, (\mathbf{x}_n, \theta_n)$, где θ_i может быть любым из c состояний природы $\omega_1, \ldots \omega_c$. Мы полагаем, что эти пары получались путем выбора состояния природы ω_j для θ_i с вероятностью $P(\omega_j)$, а затем путем выбора $\mathbf{x}_i$ в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x} \mid \omega_j)$, причем каждая пара выбирается независимо. Положим теперь, что природа выбирает пару $(\mathbf{x}, \theta)$ и что $\mathbf{x}'_n$, помеченное θ'_n, есть ближайшая к $\mathbf{x}$ выборка. Поскольку состояние природы при выборе $\mathbf{x}'_n$ не зависит от состояния при выборе $\mathbf{x}$, то

$$P(\theta, \theta'_n \mid \mathbf{x}, \mathbf{x}'_n) = P(\theta \mid \mathbf{x}) P(\theta'_n \mid \mathbf{x}'_n). \tag{30}$$

Теперь, если применяется решающее правило ближайшего соседа, мы совершаем ошибку всякий раз, когда $\theta \neq \theta'_n$. Таким образом, условная вероятность ошибки $P_n(e \mid \mathbf{x}, \mathbf{x}'_n)$ задается в виде

$$\begin{aligned} P_n(e \mid \mathbf{x}, \mathbf{x}'_n) &= 1 - \sum_{i=1}^{c} P(\theta = \omega_i, \theta'_n = \omega_i \mid \mathbf{x}, \mathbf{x}'_n) = \\ &= 1 - \sum_{i=1}^{c} P(\omega_i \mid \mathbf{x}) P(\omega_i \mid \mathbf{x}'_n). \end{aligned} \tag{31}$$

Чтобы получить $P_n(e)$, надо подставить это выражение в (29) вместо $P_n(e \mid \mathbf{x})$, а затем усреднить результат по $\mathbf{x}$. Вообще это очень трудно сделать, но, как мы уже замечали ранее, интегрирование в (29) становится тривиальным по мере устремления n к бесконечности, а $p(\mathbf{x}'_n \mid \mathbf{x})$ к дельта-функции. Если $P(\omega_i \mid \mathbf{x})$ непрерывна в $\mathbf{x}$, получаем

$$\begin{aligned} \lim_{n \to \infty} P_n(e \mid \mathbf{x}) &= \int \left[1 - \sum_{i=1}^{c} P(\omega_i \mid \mathbf{x}) P(\omega_i \mid \mathbf{x}'_n) \right] \delta(\mathbf{x}'_n - \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}'_n = \\ &= 1 - \sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i \mid \mathbf{x}). \end{aligned} \tag{32}$$

Так что асимптотический уровень ошибки правила ближайшего соседа, если можно поменять местами интегрирование и переход

к пределу[1]), задается выражением

$$P = \lim_{n\to\infty} P_n(e) =$$
$$= \lim_{n\to\infty} \int P_n(e|\mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} =$$
$$= \int \left[1 - \sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x})\right] p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}. \qquad (33)$$

4.6.4. ГРАНИЦЫ ОШИБКИ

Хотя уравнение (33) дает точный результат, еще показательнее получить границы для P, выраженные посредством байесовского уровня P^*. Очевидной нижней границей для P является сам уровень P^*. Кроме того, можно показать, что при любом P^* существует множество условных и априорных вероятностей, для которых эта граница достигается. Так что в этом смысле это точная нижняя граница.

Еще интереснее задача определения точной верхней границы. Следующее соображение позволяет надеяться на низкую верхнюю границу: если байесовский уровень небольшой, то $P(\omega_i|\mathbf{x})$ близка к единице для некоторого i, скажем $i=m$. Таким образом, подынтегральное выражение в (33) будет приближенно $1-P^2(\omega_m|\mathbf{x}) \approx \approx 2(1-P(\omega_m|\mathbf{x}))$, и поскольку

$$P^*(e|\mathbf{x}) = 1 - P(\omega_m|\mathbf{x}), \qquad (34)$$

то интегрирование по $\mathbf{x}$ может дать уровень, в два раза превышающий байесовский, но являющийся все еще низким. Чтобы получить точную верхнюю границу, мы должны определить, насколько большим может стать уровень P ошибки правила ближайшего соседа для заданного байесовского уровня P^*. Таким образом, выражение (33) вынуждает нас задаться вопросом, насколько малой может стать $\sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x})$ для заданной $P(\omega_m|\mathbf{x})$. Записав

$$\sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x}) = P^2(\omega_m|\mathbf{x}) + \sum_{i\neq m} P^2(\omega_i|\mathbf{x}),$$

мы можем получить границу этой суммы, минимизируя второй член при следующих ограничениях:

1) $P(\omega_i|\mathbf{x}) \geqslant 0$;
2) $\sum_{i\neq m} P(\omega_i|\mathbf{x}) = 1 - P(\omega_m|\mathbf{x}) = P^*(e|\mathbf{x})$.

[1]) Читатели, знакомые с теорией меры, знают, что теорема мажорированной сходимости позволяет производить подобную замену. Если существуют области, где $p(\mathbf{x})$ тождественна нулю, то уравнение (32) является недействительным для этих значений $\mathbf{x}$. (Почему?) Такие области, однако, можно исключить из интегрирования выражения (33).

Несколько поразмыслив, мы видим, что $\sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x})$ минимизируется, если все апостериорные вероятности, кроме m-й, равны, и второе ограничение дает

$$P(\omega_i|\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{P^*(e|\mathbf{x})}{c-1}, & i \neq m, \\ 1-P^*(e|\mathbf{x}), & i = m. \end{cases} \tag{35}$$

Таким образом,

$$\sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \geqslant (1-P^*(e|\mathbf{x}))^2 + \frac{P^{*2}(e|\mathbf{x})}{c-1}$$

и

$$1-\sum_{i=1}^{c} P^2(\omega_i|\mathbf{x}) \leqslant 2P^*(e|\mathbf{x}) - \frac{c}{c-1} P^{*2}(e|\mathbf{x}). \tag{36}$$

Сразу же видим, что $P \leqslant 2P^*$, поэтому можем подставить этот результат в (33) и просто опустить второй член выражения. Однако более точную границу можно получить на основании

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}\left[P^*(e|\mathbf{x})\right] &= \int [P^*(e|\mathbf{x}) - P^*]^2 p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = \\ &= \int P^{*2}(e|\mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} - P^{*2} \geqslant 0, \end{aligned}$$

так что

$$\int P^{*2}(e|\mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \geqslant P^{*2},$$

причем равенство сохраняется тогда и только тогда, когда дисперсия $P^*(e|\mathbf{x})$ равна нулю. Пользуясь этим результатом и подставляя соотношение (36) в (33), получаем желаемые границы

$$P^* \leqslant P \leqslant P^*\left(2 - \frac{c}{c-1} P^*\right). \tag{28}$$

Легко показать, что такая верхняя граница достигается в случае так называемой нулевой информации, в котором плотности распределения $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ тождественны, так что $P(\omega_i|\mathbf{x}) = P(\omega_i)$ и $P^*(e|\mathbf{x})$ не зависит от $\mathbf{x}$. Таким образом, границы, заданные (28), являются максимально близкими в том смысле, что для любой P^* существуют условные и априорные вероятности, для которых эти границы достигаются. На рис. 4.4 графически представлены эти границы. Байесовский уровень P^* может находиться в любом месте между 0 и $(c-1)/c$. Границы сходятся в этих двух крайних точках. Когда байесовский уровень мал, верхняя граница превышает его почти в два раза. В общем значение ошибки правила ближайшего соседа должно находиться в заштрихованной области.

Поскольку P всегда меньше или равна $2P^*$, то, если имеется бесконечный набор данных и используется сложное решающее пра-

вило, можно по крайней мере в два раза сократить уровень ошибки. В этом смысле по крайней мере половина классифицирующей информации бесконечного набора данных находится по соседству.

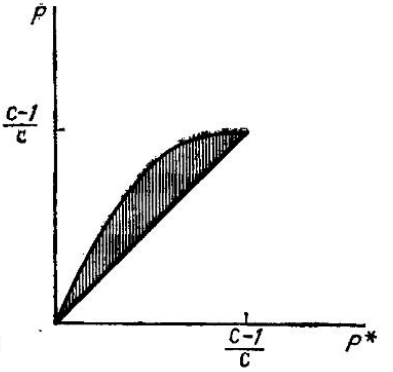


Рис. 4.4. Границы ошибки правила ближайшего соседа.

Естественно задаться вопросом, насколько хорошо правило ближайшего соседа в случае конечного числа выборок и как быстро результат сходится к асимптотическому значению. К сожалению, ответы для общего случая неблагоприятны. Можно показать, что сходимость может быть бесконечно медленной и уровень ошибки $P_n(e)$ даже не должен монотонно убывать с ростом n. Так же, как это происходит с другими непараметрическими методами, трудно получить какие-либо еще результаты, кроме асимптотических, не делая дальнейших допущений о вероятностных свойствах.

4.7. ПРАВИЛО k БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Явным расширением правила ближайшего соседа является *правило k ближайших соседей*. Как видно из названия, это правило классифицирует $\mathbf{x}$, присваивая ему метку, наиболее часто представляемую среди k ближайших выборок; другими словами, решение принимается после изучения меток k ближайших соседей. Мы не будем подробно анализировать это правило. Однако можно получить некоторые дополнительные представления об этих процедурах, рассмотрев случай с двумя классами при нечетном числе k (чтобы избежать совпадений).

Основным поводом к рассмотрению правила k ближайших соседей послужило сделанное нами ранее наблюдение о согласовании вероятностей с реальностью. Сначала мы заметили, что если k фиксировано и количеству выборок n позволить стремиться к бесконечности, то все k ближайших соседей сойдутся к $\mathbf{x}$. Следовательно, как и в случае с единственным ближайшим соседом, метками каждого из k ближайших соседей будут случайные величины, независимо принимающие значение ω_i с вероятностью $P(\omega_i|\mathbf{x})$, $i=1, 2$. Если $P(\omega_m|\mathbf{x})$ является самой большой апостериорной вероятностью, то решающее правило Байеса всегда выбирает ω_m. Правило единственного ближайшего соседа выбирает ω_m с вероятностью $P(\omega_m|\mathbf{x})$. Правило k ближайших соседей выбирает ω_m, если большинство из

k ближайших соседей имеют метку ω_m, с вероятностью

$$\sum_{i=(k+1)/2}^{k} \binom{k}{i} P(\omega_m | \mathbf{x})^i [1 - P(\omega_m | \mathbf{x})]^{k-i}.$$

В общем чем больше значение k, тем больше вероятность, что будет выбрана ω_m.

Мы могли бы проанализировать правило k ближайших соседей так же, как мы анализировали правило единственного ближайшего

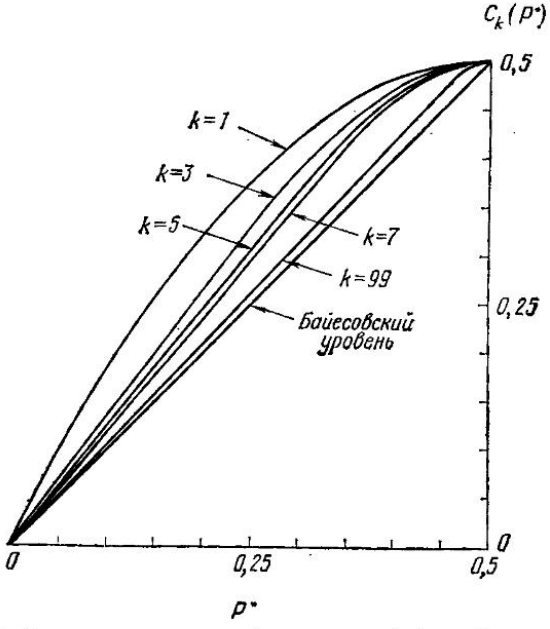


Рис. 4.5. Границы уровня ошибки правила k ближайших соседей.

соседа. Однако ввиду того, что здесь потребуются более сложные рассуждения, которые мало что проясняют, мы удовлетворимся только констатацией результатов. Можно показать, что при нечетном k величина ошибки в случае с двумя классами и большим количеством выборок для правила k ближайших соседей ограничивается сверху функцией $C_k(P^*)$, где C_k по определению есть наименьшая вогнутая функция от P^*, большая, чем

$$\sum_{i=0}^{(k-1)/2} \binom{k}{i} [(P^*)^{i+1}(1-P^*)^{k-i} + (P^*)^{k-i}(1-P^*)^{i+1}].$$

Теперь совершенно ясно, что очень мало можно увидеть, глядя на приведенную функцию, разве что только можно отметить ее род-

ство с биномиальным распределением. К счастью, можно легко вычислить $C_k(P^*)$ и изучить результаты. На рис. 4.5 показаны границы уровней ошибок правила k ближайших соседей для нескольких значений k. Случай с $k=1$ соответствует случаю с двумя классами из рис. 4.4. С возрастанием k верхние границы все более приближаются к нижней границе, уровню Байеса. В пределе, когда k стремится к бесконечности, две границы встречаются и правило k ближайших соседей становится оптимальным.

Рискуя произвести впечатление, что мы повторяемся, закончим снова упоминанием о ситуации с конечным числом выборок, встречаемой на практике. Правило k ближайших соседей можно рассматривать как еще одну попытку оценить апостериорные вероятности $P(\omega_i|\mathbf{x})$ на основании выборок. Чтобы получить надежную оценку, нам желательно использовать большое значение k. С другой стороны, мы хотим, чтобы все k ближайших соседей $\mathbf{x}'$ были очень близки к $\mathbf{x}$ с тем, чтобы быть уверенными, что $P(\omega_i|\mathbf{x}')$ приблизительно такая же, как $P(\omega_i|\mathbf{x})$. Это заставляет нас выбрать среднее значение k, являющееся небольшой частью всего количества выборок. Только в пределе при устремлении k к бесконечности можем мы быть уверены в почти оптимальном поведении правила k ближайших соседей.

4.8. АППРОКСИМАЦИИ ПУТЕМ РАЗЛОЖЕНИЯ В РЯД

Все описанные до сих пор непараметрические методы имеют тот недостаток, что требуют хранения в памяти всех выборок. А так как для получения хороших оценок необходимо большое количество выборок, потребность в памяти может быть слишком велика.

Кроме того, может потребоваться значительное время вычисления каждый раз, когда один из этих методов используется для оценки величины $p(\mathbf{x})$ или классификации нового $\mathbf{x}$. При определенных обстоятельствах процедуру окна Парзена можно несколько видоизменить, чтобы значительно сократить эти требования. Основная идея заключается в аппроксимации функции окна путем разложения ее в конечный ряд, что делается с приемлемой точностью в представляющей интерес области. Если нам сопутствует удача и мы можем найти два множества функций $\psi_j(\mathbf{x})$ и $\chi_j(\mathbf{x})$, которые допускают разложение

$$\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right) = \sum_{j=1}^{m} a_j \psi_j(\mathbf{x})\,\chi_j(\mathbf{x}_i), \tag{37}$$

тогда

$$\sum_{i=1}^{n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right) = \sum_{j=1}^{m} a_j \psi_j(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{n} \chi_j(\mathbf{x}_i),$$

и из уравнения (8) имеем

$$p_n(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{m} b_j \psi_j(\mathbf{x}), \tag{38}$$

где

$$b_j = \frac{a_j}{nV_n} \sum_{i=1}^{n} \chi_j(\mathbf{x}_i). \tag{39}$$

Этот подход имеет некоторые очевидные преимущества в том случае, когда можно получить достаточно точное разложение с приемлемым значением m. Информация, содержащаяся в n выборках, сводится к m коэффициентам b_j. Если получают дополнительные выборки, соотношение (39) для b_j можно легко обновить, причем количество коэффициентов остается неизменным[1]).

Если функции ψ_j и χ_j являются полиномами от компонент $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}_i$, то выражение для оценки $p_n(\mathbf{x})$ есть также полином, который можно довольно эффективно вычислить. Более того, использование этой оценки для получения разделяющих функций $p(\mathbf{x}|\omega_i)\,P(\omega_i)$ приводит к простому способу получения *полиномиальных разделяющих функций*.

Тут все же следует отметить одну из проблем, возникающую при применении этого способа. Основным достоинством функции окна является ее тенденция к возрастанию в начале координат и снижению в других точках. Так что $\varphi((\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)/h_n)$ будет иметь резкий максимум при $\mathbf{x}=\mathbf{x}_i$ и мало влиять на аппроксимацию $p_n(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x}$, удаленного от $\mathbf{x}_i$. К сожалению, полиномы обладают досадным свойством, заключающимся в том, что они могут содержать неограниченное количество членов. Поэтому при разложении полинома могут обнаружиться члены, ассоциируемые с $\mathbf{x}_i$, удаленным от $\mathbf{x}$, но сильно, а не слабо влияющим на разложение. Следовательно, важно убедиться, что разложение каждой функции окна действительно точное в представляющей интерес области, а для этого может потребоваться большое число членов.

Существует много видов разложения в ряд. Читатели, знакомые с интегральными уравнениями, вполне естественно интерпретируют соотношение (37) как разложение ядра $\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ в ряды по собственным функциям. Вместо вычисления собственных функций можно выбрать любое приемлемое множество функций, ортогональных в интересующей нас области, и получить согласие по методу наименьших квадратов с функцией окна. Мы применим еще более непосредственный подход и разложим функцию окна в ряд Тейлора. Для про-

[1]) Следует, однако, заметить, что если h_n уменьшается при добавлении новых выборок, то φ будет больше приближаться к выбросу и в действительности для получения точной аппроксимации может потребоваться больше членов уравнения.

стоты ограничимся одномерным случаем с гауссовской функцией окна:

$$\sqrt{\pi}\,\varphi(u) = e^{-u^2} \approx \approx \sum_{j=0}^{m-1} (-1)^j \frac{u^{2j}}{j!}.$$

Самым точным это разложение будет в окрестности $u=0$, где ошибка будет составлять менее $u^{2m}/m!$. Если мы подставим

$$u = \frac{x - x_i}{h},$$

то получим полином степени $2(m-1)$ от x и x_i. Например, если $m=2$, то

$$\sqrt{\pi}\,\varphi\left(\frac{x-x_i}{h}\right) \approx 1 - \left(\frac{x-x_i}{h}\right)^2 \approx \approx 1 + \frac{2}{h^2} x x_i - \frac{1}{h^2} x^2 - \frac{1}{h^2} x_i^2,$$

и, таким образом,

$$\sqrt{\pi}\,p_n(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\pi}\,\varphi\left(\frac{x-x_i}{h}\right) \approx b_0 + b_1 x + b_2 x^2,$$

где

$$b_0 = \frac{1}{h} - \frac{1}{h^3} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2,$$

$$b_1 = \frac{2}{h^3} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i,$$

$$b_2 = -\frac{1}{h^3}.$$

Это простое разложение «сжимает» информацию из n выборок в три коэффициента b_0, b_1 и b_2. Оно будет точным, если наибольшее значение $|x-x_i|$ не превышает h. К сожалению, это заставляет нас пользоваться очень широким окном, которое не дает большого разрешения. Беря большое количество членов, мы можем использовать более узкое окно. Если мы считаем r наибольшим значением $|x-x_i|$, то, пользуясь тем фактом, что ошибка в m-членном разложении функции $\sqrt{\pi}\,\varphi[(x-x_i)/h]$ меньше, чем $(r/h)^{2m} m!$, и пользуясь аппроксимацией Стирлинга для $m!$, найдем, что ошибка в аппроксимации $p_n(x)$ будет меньше, чем

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}\,h} \frac{\left(\frac{r}{h}\right)^{2m}}{m!} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}\,h\,\sqrt{2\pi m}} \left[\left(\frac{e}{m}\right)\left(\frac{r}{h}\right)^2\right]^m.$$

Таким образом, ошибка мала только тогда, когда $m > e(r/h)^2$. Это говорит о том, что требуется много членов, если ширина окна h невелика по сравнению с расстоянием r от x до наиболее удаленной выборки. Несмотря на то что этот пример элементарен, аналогичные рассуждения действительны и для многомерного случая, даже при использовании более сложных разложений; процедура выглядит более привлекательной, когда ширина окна относительно велика.

4.9. АППРОКСИМАЦИЯ ДЛЯ БИНАРНОГО СЛУЧАЯ

4.9.1. РАЗЛОЖЕНИЕ РАДЕМАХЕРА — УОЛША

Когда составляющие вектора $\mathbf{x}$ дискретны, задача оценки плотности распределения становится задачей оценки вероятности $P(\mathbf{x} = \mathbf{v}_k)$. По идее задача эта еще проще, нужно только считать, сколько раз наблюдается $\mathbf{x}$, чтобы получить значение $\mathbf{v}_k$, и воспользоваться законом больших чисел. Однако рассмотрим случай, когда d составляющих вектора $\mathbf{x}$ бинарны (имеют значения 0 или 1). Поскольку имеется 2^d возможных векторов $\mathbf{v}_k$, мы должны оценить 2^d вероятностей, что представляет собой огромную задачу при больших значениях d, часто возникающих в работе по распознаванию образов.

Если составляющие вектора $\mathbf{x}$ статистически независимы, задача намного упрощается. В этом случае можем написать

$$P(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} P(x_i) = \prod_{i=1}^{d} p_i^{x_i} (1 - p_i)^{1 - x_i}, \tag{40}$$

$$p_i = P(x_i = 1), \tag{41}$$

$$1 - p_i = P(x_i = 0). \tag{42}$$

Таким образом, в этом частном случае оценка для $P(\mathbf{x})$ сводится к оценке d вероятностей p_i. Более того, если мы возьмем логарифм $P(\mathbf{x})$, то увидим, что он является линейной функцией от $\mathbf{x}$, что упрощает как запоминание данных, так и вычисление:

$$\log P(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + w_0, \tag{43}$$

где,

$$w_i = \begin{cases} \log \dfrac{p_i}{1 - p_i}, & i = 1, \ldots, d, \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{d} \log (1 - p_i), & i = 0. \end{cases} \tag{44}$$

Естественно поинтересоваться, существуют ли какие-либо компромиссные решения между полной строгостью, для достижения которой требуется оценка 2^d вероятностей, и вынужденным приня-

тием статистической независимости, что сведет всю проблему к оценке только d вероятностей. Разложение для $P(\mathbf{x})$ и аппроксимация $P(\mathbf{x})$ частичной суммой дают один ответ. Когда имеются бинарные переменные, естественно использовать *полиномы Радемахера — Уолша* в качестве базисных функций. Такое множество 2^d полиномов можно получить путем систематического образования произведений различных сомножителей $2x_i-1$, которые получаются следующим образом: ни одного сомножителя, один сомножитель, два и т. д. Таким образом, имеем

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & i=0, \\ 2x_1-1, & i=1, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 2x_d-1, & i=d, \\ (2x_1-1)(2x_2-1), & i=d+1, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ (2x_{d-1}-1)(2x_d-1) & i=d+1+d(d-1)/2, \\ (2x_1-1)(2x_2-1)(2x_3-1), & i=d+2+d(d-1)/2, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ (2x_1-1)\ldots(2x_d-1), & i=2^d-1. \end{cases} \tag{45}$$

Нетрудно заметить, что эти полиномы удовлетворяют отношению ортогональности

$$\sum_{\mathbf{x}} \varphi_i(\mathbf{x})\,\varphi_j(\mathbf{x}) = \begin{cases} 2^d, & i=j, \\ 0, & i\neq j, \end{cases} \tag{46}$$

где суммирование проводится по 2^d возможным значениям $\mathbf{x}$. Итак, любую функцию $P(\mathbf{x})$, определенную на единичном d-кубе, можно разложить как

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{2^d-1} a_i \varphi_i(\mathbf{x}), \tag{47}$$

где

$$a_i = \frac{1}{2^d} \sum_{\mathbf{x}} \varphi_i(\mathbf{x})\,P(\mathbf{x}). \tag{48}$$

Рассматривая $P(\mathbf{x})$ как вероятностную функцию видим, что

$$a_i = \frac{1}{2^d} E[\varphi_i(\mathbf{x})]. \tag{49}$$

Поскольку функции Радемахера — Уолша $\varphi_l(\mathbf{x})$ — полиномы, видим, что коэффициенты a_l являются в сущности моментами. Так что, если $P(\mathbf{x})$ неизвестна, но имеется n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, коэффициенты a_l можно оценить, вычисляя моменты выборок $\hat{a}_l$:

$$\hat{a}_l = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2^d} \varphi_l(\mathbf{x}_j). \tag{50}$$

В пределе с устремлением n к бесконечности эта оценка по закону больших чисел должна сойтись (по вероятности) к истинному значению a_l.

Теперь выражение (47) дает нам точное разложение для $P(\mathbf{x})$, и в этом случае оно не упрощает наши вычисления. Вместо оценки 2^d совместных вероятностей мы должны оценить 2^d моментов — коэффициентов a_l. Можно, однако, аппроксимировать $P(\mathbf{x})$, усекая разложение и вычисляя только моменты низкого порядка. Аппроксимация первого порядка, полученная с помощью первых $1+d$ членов, будет линейной относительно $\mathbf{x}$. Аппроксимация второго порядка, содержащая первые $1+d+d(d-1)/2$ членов, будет квадратичной относительно $\mathbf{x}$[1]). В целом выражение (47) показывает, что для аппроксимации полиномами Радемахера — Уолша степени k требуется оценка моментов порядка k и ниже. Эти моменты можно оценить, исходя из данных, или вычислить непосредственно из $P(\mathbf{x})$. В последнем случае тот факт, что можно суммировать сначала по переменным, не включенным в полином, говорит о том, что нужно знать только вероятности каждой переменной порядка k. Например, разложение первого порядка определяется вероятностями $p_i = P(x_i = 1)$:

$$P_1(\mathbf{x}) = a_0 + \sum_{i=1}^{d} a_i (2x_i - 1),$$

где

$$a_l = \begin{cases} 2^{-d}, & i = 0, \\ 2^{-d}(2p_i - 1), & i = 1, \ldots, d. \end{cases}$$

Естественно поинтересоваться, насколько хорошо такое усеченное разложение аппроксимирует действительную вероятность $P(\mathbf{x})$. В общем, если мы аппроксимируем $P(\mathbf{x})$ с помощью рядов, включающих подмножество полиномов Радемахера — Уолша,

$$\tilde{P}(\mathbf{x}) = \sum_{l \in I} b_l \varphi_l(\mathbf{x}),$$

---

[1]) Поскольку компоненты вектора $\mathbf{x}$ бинарные, такие произведения, как $x_i x_j$, особенно легко вычислять; на ЭВМ их можно реализовать аппаратно с помощью схем совпадений.

то можно использовать отношения ортогональности, чтобы показать, что сумма квадратичной ошибки $\Sigma (P(\mathbf{x}) - \tilde{P}(\mathbf{x}))^2$ минимизируется выбором $b_i = a_i$. Таким образом, усеченное разложение является оптимальным в смысле среднеквадратичной ошибки. Кроме того, коль скоро в аппроксимацию входит постоянный полином φ_0, можно легко показать, что $\Sigma \tilde{P}(\mathbf{x}) = 1$, что и требуется. Однако ничто не может предотвратить превращение $\tilde{P}(\mathbf{x})$ в отрицательную величину для некоторого $\mathbf{x}$. Действительно, если φ_0 не входит в полином, то $\Sigma \tilde{P}(\mathbf{x}) = 0$ и по крайней мере одна из вероятностей должна быть отрицательной. Этого досадного результата можно избежать путем разложения $\log P(\mathbf{x})$, а не $P(\mathbf{x})$, хотя в этом случае мы уже не сможем больше быть уверены в том, что суммирование полученной аппроксимации для $P(\mathbf{x})$ даст единицу.

4.9.2. РАЗЛОЖЕНИЕ БАХАДУРА — ЛАЗАРСФЕЛЬДА

Другое интересное разложение получают введением нормированных величин

$$y_i = \frac{x_i - p_i}{\sqrt{p_i(1-p_i)}}, \tag{51}$$

считая, конечно, что p_i не является ни нулем, ни единицей. Эти нормированные переменные имеют нулевое среднее и дисперсию, равную единице. Множество полиномов, похожих на полиномы Радемахера — Уолша, можно получить, систематически образуя различные произведения сомножителей y_i в следующем порядке: ни одного сомножителя, один сомножитель, два и т. д. Так что имеем

$$\psi_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & i = 0, \\ y_1, & i = 1, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ y_d, & i = d, \\ y_1 y_2, & i = d+1, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ y_{d-1} y_d, & i = d+1+d(d-1)/2, \\ y_1 y_2 y_3, & i = d+2+d(d-1)/2, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ y_1 y_2 \ldots y_d, & i = 2^d - 1. \end{cases} \tag{52}$$

Эти полиномы не ортогональны сами по себе, но они ортогональны, если ввести весовую функцию

$$P_1(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} p_i^{x_i}(1-p_i)^{1-x_i}, \tag{53}$$

т. е.

$$\sum_{\mathbf{x}} \psi_i(\mathbf{x})\,\psi_j(\mathbf{x})\,P_1(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & i=j, \\ 0, & i\neq j. \end{cases} \tag{54}$$

Это следует из того, что $P_1(\mathbf{x})$ является распределением для случая с независимыми переменными и что в этом случае моменты $E[\psi_i(\mathbf{x})\,\psi_j(\mathbf{x})]$ являются или нулем, или единицей. Следовательно, любую функцию, определенную на единичном d-кубе, можно разложить как

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{2^d-1} a_i\psi_i(\mathbf{x}),$$

где

$$a_i = \sum_{\mathbf{x}} \psi_i(\mathbf{x})\,P_1(\mathbf{x})\,F(\mathbf{x}).$$

В частности, функцию $P(\mathbf{x})/P_1(\mathbf{x})$ можно представить в виде

$$P(\mathbf{x}) = P_1(\mathbf{x}) \sum_{i=0}^{2^d-1} a_i\psi_i(\mathbf{x}), \tag{55}$$

где

$$a_i = \sum_{\mathbf{x}} \psi_i(\mathbf{x})\,P(\mathbf{x}) = E[\psi_i(\mathbf{x})]. \tag{56}$$

Вспомнив, что $\psi_i(\mathbf{x})$ есть произведение нормированных переменных $y_i=(x_i-p_i)/\sqrt{p_i(1-p_i)}$, видим, что a_i — это коэффициенты корреляции. Очевидно, что $a_0=1$ и $a_1=\ldots a_d=0$. Если определить

$$\left.\begin{aligned} \rho_{ij} &= \sum_{\mathbf{x}} y_i y_j P(\mathbf{x}), \\ \rho_{ijk} &= \sum_{\mathbf{x}} y_i y_j y_k P(\mathbf{x}), \\ &\cdots \\ \rho_{12\ldots d} &= \sum_{\mathbf{x}} y_1 y_2 \ldots y_d P(\mathbf{x}), \end{aligned}\right\} \tag{57}$$

то можно представить соотношение (55) как

$$P(\mathbf{x}) = P_1(\mathbf{x})\left[1 + \sum_{i<j}\rho_{ij}y_iy_j + \sum_{i<j<k}\rho_{ijk}y_iy_jy_k + \ldots + \rho_{12\ldots d}y_1y_2\ldots y_d\right]. \tag{58}$$

Оно известно как *разложение Бахадура — Лазарсфельда* $P(\mathbf{x})$. В нем содержится 2^d-1 коэффициентов, d вероятностей p_i первого порядка, $\binom{d}{2}$ коэффициентов корреляции ρ_{ij} второго порядка, $\binom{d}{3}$ коэффициентов корреляции ρ_{ijk} третьего порядка и т. д. Естественный способ аппроксимировать $P(\mathbf{x})$ — это игнорировать все корреляции свыше определенного порядка. Таким образом,

$$P_1(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} p_i^{x_i} (1-p_i)^{1-x_i}$$

есть аппроксимация первого порядка $P(\mathbf{x})$,

$$P_2(\mathbf{x}) = P_1(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i<j} \rho_{ij} y_i y_j\right]$$

есть аппроксимация второго порядка и т. д. Если коэффициенты корреляции высокого порядка невелики и мы используем аппроксимацию $\log(1+x) \approx x$, то видим, что $\log P_1(\mathbf{x})$ линейный относительно $\mathbf{x}$, $\log P_2(\mathbf{x})$ добавляет квадратичный член корреляции и т. д. Таким образом, логарифм разложения Бахадура — Лазарсфельда дает интересную последовательность аппроксимаций. Первая аппроксимация эквивалентна допущению независимости, и она линейна относительно $\mathbf{x}$. Вторая отвечает корреляции второго порядка и квадратична относительно $\mathbf{x}$. Каждая последующая аппроксимация отвечает корреляциям более высокого порядка, но, конечно, требует вычисления большего количества членов.

4.9.3. РАЗЛОЖЕНИЕ ЧОУ

Другой интересный класс аппроксимаций совместного распределения вероятностей $P(\mathbf{x})$ основан на тождестве

$$P(\mathbf{x}) = P(x_1, \ldots, x_d) = P(x_1)\, P(x_2 \mid x_1)\, P(x_3 \mid x_2, x_1) \ldots \\ \ldots P(x_d \mid x_{d-1}, \ldots, x_1). \quad (59)$$

Если переменные статистически независимы, оно сводится к произведению отдельных вероятностей $P(x_i)$. Предположим, что переменные не являются независимыми, но что $P(x_i \mid x_{i-1}, \ldots, x_1)$ зависит только от непосредственно предшествующей переменной x_{i-1}. Тогда имеем марковскую цепь первого порядка и

$$P(\mathbf{x}) = P(x_1)\, P(x_2 \mid x_1)\, P(x_3 \mid x_2) \ldots P(x_d \mid x_{d-1}). \quad (60)$$

Мы увидим, что каждый сомножитель $P(x_i \mid x_{i-1})$ можно определить с помощью двух коэффициентов; значит, $P(\mathbf{x})$ можно определить с помощью $2d-1$ коэффициентов, что будет менее сложно, чем если бы мы допустили все $\binom{d}{2}$ корреляций второго порядка. Аналогичные марковские аппроксимации более высокого порядка можно по-

лучить, если допустить, что x_i зависит только от k непосредственно предшествующих переменных.

Допущение, что заданная переменная x_i зависит только от определенных предшествующих переменных, приемлемо, если мы имеем дело с временным процессом; для более общих случаев это допущение выглядит довольно нелепо. Тем не менее есть основание полагать, что заданная переменная x_i может в основном зависеть только от нескольких других переменных. Предположим, что мы можем занумеровать переменные так, что $P(x_i|x_{i-1}, \ldots, x_1)$ целиком зависит от некоторой предшествующей переменной $x_{j(i)}$.

Например, допустим, что

$$P(x_4|x_3, x_2, x_1) = P(x_4|x_2) \text{ и } P(x_3|x_2, x_1) = P(x_3|x_1).$$

Тогда из (59) следует, что $P(x_1, x_2, x_3, x_4)$ можно записать как $P(x_1)P(x_2|x_1)P(x_3|x_1)P(x_4|x_2)$. Вообще мы получаем разложение в виде произведения

$$P(\mathbf{x}) = P(x_1)P(x_2|x_{j(2)}) \ldots P(x_d|x_{j(d)}). \tag{61}$$

Подставляя 0 или 1 вместо x_i и $x_{j(i)}$, читатель может проверить, что

$$P(x_i|x_{j(i)}) = \left[p_i^{x_i}(1-p_i)^{1-x_i}\right]^{x_{j(i)}}\left[q_i^{x_i}(1-q_i)^{1-x_i}\right]^{1-x_{j(i)}}, \tag{62}$$

где

$$p_i = P(x_i = 1|x_{j(i)} = 1) \tag{63}$$

и

$$q_i = P(x_i = 1|x_{j(i)} = 0). \tag{64}$$

Полагая $q_1 = P(x_1 = 1)$, подставляя (62) в соотношение (61), беря логарифм и собирая члены, получаем *разложение Чоу*

$$\log P(x) = \sum_{i=1}^{d} \log(1-q_i) + \sum_{i=1}^{d} x_i \log\frac{q_i}{1-q_i} + \sum_{i=2}^{d} x_{j(i)} \log\frac{1-p_i}{1-q_i} + \sum_{i=2}^{d} x_i x_{j(i)} \log\frac{p_i(1-q_i)}{(1-p_i)q_i}. \tag{65}$$

Аналогичные результаты легко можно получить для зависимости более высокого порядка.

Следует сделать несколько замечаний относительно этих результатов. Во-первых, если переменные действительно независимы, мы замечаем, что $p_i = q_i$ и последние две суммы в разложении исчезают, оставляя уже знакомые разложения для случая с независимыми переменными. Когда зависимость имеется, мы получаем дополнительные линейные и квадратичные члены. Конечно, линейные члены можно объединить так, чтобы в разложении содержались константа, d линейных членов и $d-1$ квадратичных членов.

Сравнивая это разложение с разложением второго порядка Рademахера — Уолша или Бахадура — Лазерсфельда, для каждого из которых требуется $d(d-1)/2$ квадратичных членов, видим, что преимущества данного разложения могут быть значительными. Конечно, эти преимущества можно реализовать только в том случае, если мы знаем *дерево зависимости* — функцию $j(i)$, которая показывает ограниченную зависимость одной переменной от предыдущих переменных. Если дерево зависимости нельзя вывести из физической значимости переменных, то может возникнуть необходимость в вычислении всех коэффициентов корреляции просто для того, чтобы найти значимые. Однако следует заметить, что даже в этом случае может быть предпочтительнее использовать разложение Чоу, так как получаемые при этом приближенные вероятности будут всегда неотрицательными и их сумма будет равна единице.

4.10. ЛИНЕЙНЫЙ ДИСКРИМИНАНТ ФИШЕРА

Одной из непреходящих проблем, с которой сталкиваются при применении статистических методов для распознавания образов, является то, что Беллманом было названо проклятием размерности. Процедуры, выполнимые аналитически или непосредственным вычислением в пространствах небольшой размерности, могут стать совершенно неприменимыми в пространстве с 50 или 100 измерениями. Были разработаны различные методы уменьшения размерности пространства признаков в надежде получить задачу, поддающуюся решению.

Можно уменьшить размерность с d измерений до одного, просто проецируя d-мерные данные на прямую. Конечно, особенно если выборки образуют хорошо разделенные компактные группы в d-пространстве, проекция на произвольную прямую обычно смешивает выборки из всех классов. Однако, вращая эту прямую, мы можем найти такую ориентацию, для которой спроецированные выборки будут хорошо разделены. Именно это является целью классического дискриминантного анализа.

Предположим, что мы имеем множество n d-мерных выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, n_1 в подмножестве $\mathscr{X}_1$, помеченном ω_1, и n_2 в подмножестве $\mathscr{X}_2$, помеченном ω_2. Если мы образуем линейную комбинацию компонент вектора $\mathbf{x}$, получим скалярную величину

$$y = \mathbf{w}^t\mathbf{x} \tag{66}$$

и соответствующее множество n выборок $y_1, \ldots, y_n$, разделенное на подмножества $\mathscr{Y}_1$ и $\mathscr{Y}_2$. Геометрически, если $\|\mathbf{w}\|=1$, каждая компонента y_i есть проекция соответствующего $\mathbf{x}_i$ на прямую в направлении $\mathbf{w}$. В действительности величина $\mathbf{w}$ не имеет реального значения, поскольку она просто определяет масштаб y. Однако направление $\mathbf{w}$ имеет значение. Если мы вообразим, что выборки,

помеченные ω_1, попадают более или менее в одну группу, а выборки, помеченные ω_2, попадают в другую, то мы хотим, чтобы проекции на прямой были хорошо разделены и не очень перемешаны. На рис. 4.6 показан выбор двух различных значений $\mathbf{w}$ для двумерного случая.

Мерой разделения спроецированных точек служит разность средних значений выборки. Если $\mathbf{m}_i$ есть среднее значение d-мерной вы-

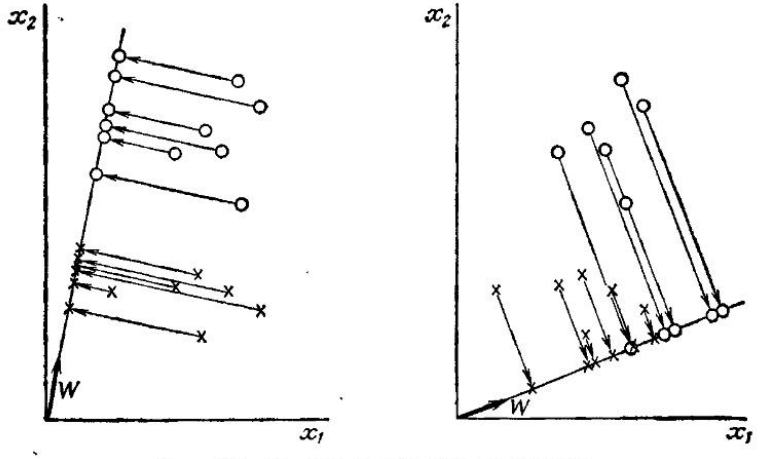


Рис. 4.6. Проекция выборок на прямую.

борки, заданное как

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}, \tag{67}$$

то среднее значение выборки для спроецированных точек задается посредством

$$\tilde{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{y \in \mathcal{Y}_i} y = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{w}^t \mathbf{x} = \mathbf{w}^t \mathbf{m}_i. \tag{68}$$

Отсюда следует, что $|\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2| = |\mathbf{w}^t(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)|$ и что мы можем сделать эту разность сколь угодно большой, просто масштабируя $\mathbf{w}$. Конечно, чтобы получить хорошее разделение спроецированных данных, мы хотим, чтобы разность между средними значениями была велика относительно некоторого показателя стандартных отклонений для каждого класса. Вместо получения дисперсий выборок определим *разброс* для спроецированных выборок, помеченных ω_i, посредством

$$\tilde{s}_i^2 = \sum_{y \in \mathcal{Y}_i} (y - \tilde{m}_i)^2. \tag{69}$$

Таким образом, $(1/n)(\tilde{s}_1^2+\tilde{s}_2^2)$ является оценкой дисперсии совокупности данных, а $\tilde{s}_1^2+\tilde{s}_2^2$ называется полным *разбросом внутри класса* спроецированных выборок. *Линейный дискриминант Фишера* тогда определяется как такая линейная разделяющая функция [1] $\mathbf{w}^t\mathbf{x}$, для которой *функция критерия*

$$J(\mathbf{w}) = \frac{|\tilde{m}_1-\tilde{m}_2|^2}{\tilde{s}_1^2+\tilde{s}_2^2} \tag{70}$$

максимальна.

Чтобы получить J как явную функцию от $\mathbf{w}$, определим *матрицы разброса* S_i и S_W посредством

$$S_i = \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i} (\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t \tag{71}$$

и

$$S_W = S_1+S_2. \tag{72}$$

Тогда

$$\begin{aligned}\tilde{s}_i^2 &= \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i} (\mathbf{w}^t\mathbf{x}-\mathbf{w}^t\mathbf{m}_i)^2 = \\ &= \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i} \mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t\mathbf{w} = \\ &= \mathbf{w}^t S_i \mathbf{w},\end{aligned} \tag{73}$$

так что

$$\tilde{s}_1^2+\tilde{s}_2^2 = \mathbf{w}^t S_W \mathbf{w}. \tag{74}$$

Аналогично

$$\begin{aligned}(\tilde{m}_1-\tilde{m}_2)^2 &= (\mathbf{w}^t\mathbf{m}_1-\mathbf{w}^t\mathbf{m}_2)^2 = \\ &= \mathbf{w}^t(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t\mathbf{w} = \\ &= \mathbf{w}^t S_B \mathbf{w},\end{aligned} \tag{75}$$

где

$$S_B = (\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t. \tag{76}$$

Матрица S_W называется *матрицей разброса внутри класса*. Она пропорциональна ковариационной выборочной матрице для совокупности d-мерных данных. Она будет симметричной, положительно полуопределенной и, как правило, невырожденной, если $n>d$. S_B называется *матрицей разброса между классами*. Она также

[1] Следует отметить, что теперь мы употребляем термин «разделяющая функция» для обозначения любой функции от $\mathbf{x}$, которая помогает в решении задачи принятия решения; мы не настаиваем на том, чтобы результирующая разделяющая функция использовалась непосредственно для определения классификатора. Так как $y=\mathbf{w}^t\mathbf{x}$ есть сумма случайных величин, общепринято ссылаться на центральную предельную теорему и допускать, что $p(y|\omega_i)$ является нормальной плотностью, упрощая этим задачу получения классификатора. Когда это допущение не оправдывается, можно позволить себе использовать довольно сложные методы оценки $p(y|\omega_i)$ и выведения «оптимального» классификатора.

симметричная и положительно полуопределенная, но из-за того, что она является внешним произведением двух векторов, ее ранг будет самое большее единица. В частности, для любого $\mathbf{w}$ направление $S_B\mathbf{w}$ совпадает с направлением $\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2$ и S_B— вполне вырожденная матрица.

При помощи S_B и S_W функцию критерия J можно представить в виде

$$J(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^t S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^t S_W \mathbf{w}}. \tag{77}$$

Это выражение хорошо известно в математической физике как обобщенное частное Релея. Легко показать, что вектор $\mathbf{w}$, который максимизирует J, должен удовлетворять соотношению

$$S_B\mathbf{w} = \lambda S_W\mathbf{w}, \tag{78}$$

что является обобщенной задачей определения собственного значения. Если S_W является невырожденной, мы можем получить обычную задачу определения собственного значения, написав

$$S_W^{-1}S_B\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w}. \tag{79}$$

В нашем частном случае не нужно находить собственные значения и собственные векторы $S_W^{-1}S_B$ из-за того, что направление $S_B\,\mathbf{w}$ всегда совпадает с направлением $\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2$. Поскольку масштабный множитель для $\mathbf{w}$ несуществен, мы можем сразу написать решение

$$\mathbf{w} = S_W^{-1}(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2). \tag{80}$$

Таким образом, мы получили линейный дискриминант Фишера — линейную функцию с максимальным отношением разброса между классами к разбросу внутри класса. Задача была преобразована из d-мерной в более приемлемую одномерную. Это отображение n-мерного множества на одномерное, и теоретически оно не может уменьшить минимально достижимый уровень ошибки. В общем мы охотно жертвуем некоторыми теоретически достижимыми результатами ради преимущества работы в одномерном пространстве. Когда же условные плотности распределения $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ являются многомерными нормальными с равными ковариационными матрицами Σ, то даже не нужно ничем жертвовать. В этом случае мы вспоминаем, что граница оптимальных решений удовлетворяет уравнению

$$\mathbf{w}^t\mathbf{x} + w_0 = 0,$$

где

$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)$$

и w_0 есть константа, включающая в себя $\mathbf{w}$ и априорные вероятности. Если мы используем средние значения и ковариационную матрицу выборок для оценки $\boldsymbol{\mu}_i$ и Σ, то получаем вектор в том же направлении, что и $\mathbf{w}$, удовлетворяющий (80), который максимизирует J.

Таким образом, для нормального случая с равными ковариациями оптимальным решающим правилом будет просто решение ω_1, если линейный дискриминант Фишера превышает некоторое пороговое значение, и решение ω_2 — в противном случае.

4.11. МНОЖЕСТВЕННЫЙ ДИСКРИМИНАНТНЫЙ АНАЛИЗ

Для задачи с c классами естественное обобщение линейного дискриминанта Фишера включает $c-1$ разделяющих функций. Таким образом, проекция будет из d-мерного пространства на $(c-1)$-мерное пространство, причем принимается, что $d \geqslant c$. Обобщение для матрицы разброса внутри класса очевидное:

$$S_W = \sum_{i=1}^{c} S_i, \tag{81}$$

где, как и прежде,

$$S_i = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^t \tag{82}$$

и

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}. \tag{83}$$

Соответствующее обобщение для S_B не так очевидно. Предположим, что мы определяем *полный вектор средних значений* $\mathbf{m}$ и *полную матрицу разброса* S_T посредством

$$\mathbf{m} = \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{c} n_i \mathbf{m}_i \tag{84}$$

и

$$S_T = \sum_{\mathbf{x}} (\mathbf{x} - \mathbf{m})(\mathbf{x} - \mathbf{m})^t. \tag{85}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} S_T &= \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i + \mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i + \mathbf{m}_i - \mathbf{m})^t = \\ &= \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^t + \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^t = \\ &= S_W + \sum_{i=1}^{c} n_i (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^t. \end{aligned}$$

Естественно определять этот второй член как матрицу разброса между классами, так что полный разброс есть сумма разброса внут-

ри класса и разброса между классами:

$$S_B = \sum_{i=1}^{c} n_i (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^t \tag{86}$$

и

$$S_T = S_W + S_B. \tag{87}$$

В случае с двумя классами мы обнаружим, что полученная в результате матрица разброса между классами будет в $n_1 n_2/n$ раз больше нашего предыдущего определения. Мы могли бы переопределить S_B для случая с двумя классами, чтобы добиться полного согласования, но вспомнив замечание Эмерсона о том, что бессмысленное согласование — идол недалеких умов, пойдем дальше.

Проекция из d-мерного пространства в $(c-1)$-мерное пространство осуществляется с помощью $c-1$ разделяющих функций

$$y_i = \mathbf{w}_i^t \mathbf{x}, \quad i = 1, \ldots, c-1. \tag{88}$$

Если считать y_i составляющими вектора $\mathbf{y}$, а векторы весовых функций $\mathbf{w}_i$ столбцами матрицы W размера $d \times (c-1)$, то проекцию можно записать в виде одного матричного уравнения

$$\mathbf{y} = W^t \mathbf{x}. \tag{89}$$

Выборки $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ проецируются на соответствующее множество выборок $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$, которые можно описать с помощью их векторов средних значений и матриц разброса. Так, если мы определяем

$$\tilde{\mathbf{m}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i} \mathbf{y}, \tag{90}$$

$$\tilde{\mathbf{m}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{c} n_i \tilde{\mathbf{m}}_i, \tag{91}$$

$$\tilde{S}_W = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i} (\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{m}}_i)(\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{m}}_i)^t \tag{92}$$

и

$$\tilde{S}_B = \sum_{i=1}^{c} n_i (\tilde{\mathbf{m}}_i - \tilde{\mathbf{m}})(\tilde{\mathbf{m}}_i - \tilde{\mathbf{m}})^t, \tag{93}$$

то можно непосредственно получить

$$\tilde{S}_W = W^t S_W W \tag{94}$$

и

$$\tilde{S}_B = W^t S_B W. \tag{95}$$

Эти уравнения показывают, как матрицы разброса внутри класса и между классами отображаются посредством проекции в пространство меньшей размерности. Мы ищем матрицу отображения W,

которая в некотором смысле максимизирует отношение разброса между классами к разбросу внутри класса. Простым скалярным показателем разброса является определитель матрицы разброса. Определитель есть произведение собственных значений, а следовательно, и произведение «дисперсий» в основных направлениях, измеряющее объем гиперэллипсоида разброса. Пользуясь этим показателем, получим функцию критерия

$$J(W)=\frac{|\tilde{S}_B|}{|\tilde{S}_W|}=\frac{|W^tS_BW|}{|W^tS_WW|}. \tag{96}$$

Задача нахождения прямоугольной матрицы W, которая максимизирует J, не из легких. К счастью, оказывается, что ее решение имеет относительно простой вид [1]). Столбцы оптимальной матрицы W являются обобщенными собственными векторами, соответствующими наибольшим собственным значениям в

$$S_B\mathbf{w}_i=\lambda_iS_W\mathbf{w}_i. \tag{97}$$

Следует сделать несколько замечаний относительно этого решения. Во-первых, если S_W — невырожденная матрица, то задачу, как и прежде, можно свести к обычной задаче определения собственного значения. Однако в действительности это нежелательно, так как при этом потребуется ненужное вычисление матрицы, обратной S_W. Вместо этого можно найти собственные значения как корни характеристического полинома

$$|S_B-\lambda_iS_W|=0,$$

а затем решить

$$(S_B-\lambda_iS_W)\,\mathbf{w}_i=0$$

непосредственно для собственных векторов $\mathbf{w}_i$. Поскольку S_B является суммой c матриц ранга единица или менее и поскольку только c—1 из них независимые матрицы, S_B имеет ранг c—1 или меньше. Так что не более c—1 собственных значений не нули и искомые векторы весовых функций соответствуют этим ненулевым собственным значениям. Если разброс внутри класса изотропный, собственные векторы будут просто собственными векторами матрицы S_B, а собственные векторы с ненулевыми собственными значениями стягивают пространство, натянутое на векторы $\mathbf{m}_i$—$\mathbf{m}$. В этом частном случае столбцы матрицы W можно найти, просто применяя процедуру ортонормирования Грама — Шмидта к c—1 векторам $\mathbf{m}_i$. Наконец, заметим, что, вообще говоря, решение для W не является однозначным. Допустимые преобразования включают вращение и масштабирование осей различными путями. Это все линейные преобразования из (c—1)-мерного пространства в (c—1)-мерное пространство, и они

[1]) Вывод решения можно найти в книге S. Wilks, Mathematical Statistics, pp. 577—578 (John Wiley, New York, 1962). [Русский перевод: Уилкс С., Математическая статистика, «Наука», М., 1967.]

не меняют значительно положения вещей. В частности, они оставляют функцию критерия $J(W)$ инвариантной.

Как и в случае с двумя классами, множественный дискриминантный анализ в первую очередь позволяет сократить размерность задачи. Параметрические или непараметрические методы, которые могут не сработать в первоначальном (многомерном) пространстве, могут хорошо действовать в пространстве меньшей размерности. В частности, можно будет оценить отдельные ковариационные матрицы для каждого класса и использовать допущение об общем многомерном нормальном распределении после преобразования, что было невозможно сделать с первоначальными данными. Вообще преобразование влечет за собой некоторое ненужное перемешивание данных и повышает теоретически достижимый уровень ошибки, а проблема классификации данных все еще остается. Существуют другие пути уменьшения размерности данных, и мы вернемся к этой теме в гл. 6. Существуют также другие методы дискриминантного анализа; некоторые из них упоминаются в литературе к этой главе. Одним из самых фундаментальных и наиболее широко используемых методов все же остается метод Фишера.

4.12. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

В данной главе мы рассмотрели некоторые фундаментальные непараметрические методы, которые играют значительную роль в статистической классификации образов. Неупомянутыми остались многие другие вопросы непараметрической статистики, и заинтересованный в этих вопросах читатель может обратиться к работам Гиббонса (1971) или Томаса (1970) за введением в литературу по этим вопросам. Классической традицией в статистике является вывод оценок плотности распределения вероятностей из эмпирических функций распределения (Фиш, 1963), но для многомерного случая это довольно громоздкий метод. В часто упоминаемом, но довольно труднодоступном отчете Фикса и Ходжеса (1951) разработаны методы применения оценки плотности распределения в теории классификации. Эта работа явилась отправной для большинства дальнейших исследований в области оценки плотности распределения.

Наше изложение метода окна Парзена является некоторым обобщением одномерной формулировки Розенблатта (1956). В действительности работа Розенблатта предшествовала работе Парзена (1962), но Парзен еще раньше использовал аналогичные методы для оценки спектров, и термин «окно Парзена» является хорошо установившимся. Кроме того, что Парзен продемонстрировал точечную сходимость, он показал, что оценка плотности является асимптотически нормальной, и определил условия, при которых результирующая мода выборки сходится к истинной моде. Связь между

оценкой плотностей и оценкой спектров говорит о том, что, работая с характеристическими функциями, можно получить интересные результаты в частотной области. Ватсон и Лидбеттер (1963), пользуясь этим методом, показали, как можно было бы оптимизировать функции окна в случае с конечным числом выборок, если бы можно было наложить ограничения на спектр неизвестных плотностей. Несомненно, этот метод можно было бы использовать для переноса многих результатов теории фильтрации в решение проблемы оценки плотностей. За исключением работ Фикса и Ходжеса, все эти результаты приводились для одномерного случая. Основные обобщения для многомерного случая были сделаны Мёрти (1965, 1966) и Какоулосом (1966).

Строгое доказательство того, что метод k_n ближайших соседей дает состоятельную оценку многомерной плотности, приведено Лофтсгарденом и Квешенберри (1965). Удивительные результаты классификации методом ближайшего соседа получены в работе Ковера и Харта (1967), авторы которой установили также границы действия правила k ближайших соседей. Вагнер (1971) расширил эти результаты, показав, что вероятность условной ошибки при n выборках сходится с вероятностью единица к среднему значению вероятности ошибки $P_y(e)$. Хелман (1970) показал, как можно дополнить правило ближайшего соседа, чтобы оно позволяло включить в рассмотрение отказы от принятия решений. Важные вопросы скорости сходимости рассматривались Ковером (1968). Поскольку уровень ошибки правила ближайшего соседа ограничивает уровень Байеса, его можно использовать для измерения трудности, присущей задаче классификации образов. Ковер (1969) высказывает предположение, что даже в случае с небольшим числом выборок результаты будут свидетельствовать о том, насколько хорошо будет работать любая непараметрическая процедура, использующая те же самые выборки. Фрелик и Скотт (1971) проводят экспериментальное сравнение использования правил окна Парзена и ближайшего соседа для оценки уровня ошибки Байеса.

У всех этих методов есть один общий недостаток — для них следует хранить полное множество выборок, поиск по которому производится каждый раз, когда нужно классифицировать новый вектор признаков. Предлагался ряд методов уменьшения числа выборок, но только для немногих из них известны какие-либо статистические свойства. Барус (1966) предложил интересную аппроксимацию для процедуры Фикса и Ходжеса, а Харт (1968) — сжатое правило ближайшего соседа. Задача нахождения эффективного небольшого опорного множества будет являться, по существу, задачей разбиения совокупности на группы. Более того, определенные процедуры разбиения совокупности на группы, такие, как предложенные Себестьяном (1962) и Себестьяном и Эди (1966), можно считать эвристическими методами аппроксимации плотно-

стей распределения вероятностей. Тартер, Холкомб и Кронмел (1967) предложили использовать для оценки плотности распределения вероятностей разложение в ортогональные ряды. Идея получения полиномиальных разделяющих функций путем аппроксимации оценки окна Парзена с помощью рядов Тейлора была высказана Спештом (1967). Мейзел (1969) указал, что для сходимости таких разложений может потребоваться много членов, и связал метод окна Парзена с методом потенциальных функций Аркадьева и Бравермана (1966). Метод потенциальных функций соотнесен с адаптивными методами и методами стохастической аппроксимации, рассмотренными в гл. 5. Большинство из этих методов связано с получением апостериорных вероятностей. Однако Цыпкин (1966) и Кашьяп и Блайдон (1968) показали, что теоретически их также можно использовать для оценки плотностей распределения.

Необходимость в преимущественно бинарных измерениях во многих практических системах распознавания образов вынесла вопросы оценки совместной вероятности бинарных переменных за рамки чисто академического интереса. Разложение Радемахера — Уолша часто встречается в теории переключений, и оно тесно связано с разложением Бахадура — Лазарсфельда. Бахадур (1961) дает расширение этого последнего разложения, перенося его с бинарного случая на общий дискретный случай. Если же разложения по ортогональным функциям минимизируют среднеквадратичную ошибку, Браун (1959) и Льюис (1959) показывают, что при определенных условиях аппроксимация произведений максимизирует энтропию. Ито (1969) приводит границы уровня ошибки, возникающей в результате усечения разложений в ряд. Идея об упрощении аппроксимаций за счет ограничения характера зависимости изучалась Чоу (1962) и Абендом, Харли и Кеналом (1965), которые, в частности, интересовались естественными пространственными зависимостями в бинарных картинах. Чоу (1966) была высказана интересная идея о древовидной зависимости, а методы нахождения дерева зависимости сообщаются Чоу и Лю (1966, 1968). Значительное расширение этой концепции на многомерный нормальный случай приводится Чоу (1970).

Дискриминантный анализ берет начало в классической работе Фишера (1936). Литература по этому предмету довольно обширная, и хороший обзор по ней сделан Тацуокой и Тайдменом (1954). Обобщение метода линейного дискриминанта Фишера на случай со многими классами сделано Брайаном (1951). Можно получить линейные разделяющие функции других типов, используя не отношение разброса между классами к разбросу внутри класса, а другие критерии. Кульбаком (1959) предлагаются другие критерии и исследуются их характеристики. Петерсон и Матсон (1966) разработали общую процедуру нахождения оптимальной разделяющей функции для довольно широкого класса функций критерия. Как мы уже

говорили ранее, цель всех этих методов заключается в уменьшении размерности пространства признаков, а результирующие разделяющие функции сами по себе не разрешают проблему классификации. Разделяющие функции, которые будут рассматриваться в следующей главе, предназначены для непосредственного решения проблемы классификации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Абенд, Харли, Кенал (Abend K., Harley T. J., Kanal L. N.)
Classification of binary random patterns, *IEEE Trans. Infor. Theory*, **IT-11**, 538—544 (October 1965).

Аркадьев А. Г., Браверман Э. М.
Обучение машины классификации объектов, М., «Наука», 1971.

Барус (Barus C.)
An easily mechanized scheme for an adaptive pattern recognizer, *IEEE Trans. Elect. Comp.*, **EC-15**, 385—387 (June 1966).

Бахадур (Bahadur R. R.)
A representation of the joint distribution of responses to n dichotomous items, in Studies in Item Analysis and Prediction, pp. 158—168, H. Solomon, ed. (Stanford University Press, Stanford, Calif., 1961).

Брайан (Bryan J. G.)
The generalized discriminant function: mathematical foundation and computational routine, *Harvard Educ. Rev.*, **21**, 90—95 (Spring 1951).

Браун (Brown D. T.)
A note on approximations to discrete probability distributions, *Info. and Control*, **2**, 386—392 (December 1959).

Вагнер (Wagner T. J.)
Convergence of the nearest neighbor rule, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-17**, 566—571 (September 1971).

Ватсон, Лидбеттер (Watson G. S., Leadbetter M. R.)
On the estimation of a probability density, I, *Ann. Math. Stat.*, **34**, 480—491 (June 1963).

Гиббонс (Gibbons J. D.)
Nonparametric Statistical Inference (McGraw-Hill, New York, 1971).

Ито (Ito T.)
Note on a class of statistical recognition functions, *IEEE Trans. Computers*, **C-18**, 76—79 (January 1969).

Какоулос (Cacoullos T.)
Estimation of a multivariate density, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, **18**, 179—189 (1966).

Кашьяп, Блайдон (Kashyap R. L., Blaydon C. C.)
Estimation of probability density and distributions functions, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 549—556 (July 1968).

Ковер (Cover T. M.)
Rates of convergence of nearest neighbor decision procedures, Proc. First Annual Hawaii Conference on Systems Theory, pp. 413—415 (January 1968).

Ковер (Cover T. M.)
Learning in pattern recognition, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 111—132, S. Watanabe, ed. (Academic Press, New York, 1969).

Ковер, Харт (Cover T. M., Hart P. E.)
Nearest neighbor pattern classification, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-13**, 21—27 (January 1967).

Кульбак (Kullback S.)
Information Theory and Statistics (John Wiley, New York, 1959). [Русский перевод: Теория информации и статистика, «Наука», М., 1967.]

Лофтсгарден, Квешенберри (Loftsgaarden D. O., Quesenberry C. P.)
A nonparametric estimate of a multivariate density function, *Ann. Math. Stat.*, **36**, 1049—1051 (June 1965).
Льюис (Lewis P. M.)
Approximating probability distributions to reduce storage requirements, *Info. and Control*, **2**, 214—225 (1959).
Мейзел (Meisel W. S.)
Potential functions in mathematical pattern recognition, *IEEE Trans. Computers*, **C-18**, 911—918 (October 1969).
Мёртн (Murthy V. K.)
Estimation of probability density, *Ann. Math. Stat.*, **36**, 1027—1031 (June 1965).
Мёрти (Murthy V. K.)
Nonparametric estimation of multivariate densities with applications, in Multivariate Analysis, pp. 43—56. P. R. Krishnaiah, ed. (Academic Press, New York, 1966).
Парзен (Parzen E.)
On estimation of a probability density function and mode, *Ann. Math. Stat.*, **33**, 1065—1076 (September 1962).
Петерсон, Матсои (Peterson D. W., Mattson R. L.)
A method of finding linear discriminant functions for a class of performance criteria, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-12**, 380—387 (July 1966).
Розенблатт (Rosenblatt M.)
Remarks on some nonparametric estimates of a density function, *Ann. Math. Stat.*, 27, 832—837 (1956).
Себестьян (Sebestyen G. S.)
Pattern recognition by an adaptive process of sample set construction, *IRE Trans. Info. Theory*, **IT-8**, S82—S91 (September 1962).
Себестьян, Эди (Sebestyen G. S., Edie J. L.)
An algorithm for nonparametric pattern recognition, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-15**, 908—915 (December 1966).
Спешт (Specht D. F.)
Generation of polynomial discriminant functions for pattern recognition, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-16**, 308—319 (June 1967).
Тартер, Холкомб, Кронмел (Tarter M. E., Holcomb R. L., Kronmal R. A.)
After the histogram what? A description of new computer methods for estimating the population density, ACM, Proc. 22nd Nat. Conf., pp. 511—519 (Thompson Book Co., Washington, D. C., 1967).
Тацуока, Тайдмен (Tatsuoka M. M., Tiedeman D. V.)
Discriminant analysis, *Rev. Educ. Res.*, **24**, 402—420 (1954).
Томас (Thomas J. B.)
Nonparametric detection, *Proc. IEEE*, **58**, 623—631 (May 1970).
Фикс, Ходжес (Fix E., Hodges J. L., Jr.)
Discriminatory analysis: nonparametric discrimination: consistency properties. Report № 4, USAF School of Aviation Medicine, Randolph Field, Texas (February 1951).
Фиш (Fisz M.)
Probability Theory and Mathematical Statistics (John Wiley, New York, 1963).
Фишер (Fischer R. A.)
The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Ann. Eugenics*, **7**, Part II, 179—188 (1936); also in Contributions to Mathematical Statistics (John Wiley, New York, 1950).
Фрелик, Скотт (Fralick S. C., Scott R. W.)
Nonparametric Bayes risk estimation, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-17**, 440—444 (July 1971).
Харт (Hart P. E.)
The condensed nearest neighbor rule, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 515—516 (May 1968).

Хелман (Hellman M. E.)
The nearest neighbor classification rule with a reject option, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-6**, 179—185 (July 1970).
Цыпкин Я. З.
Применение метода стохастической аппроксимации к оценке неизвестной плотности распределения по наблюдениям, *Автоматика и телемеханика*, 27, 94—96 (март 1966).
Чоу (Chow C. K.)
A recognition method using neighbor dependence, *IRE Trans. Elect. Comp.*, **EC-11**, 683—690 (October 1962).
Чоу (Chow C. K.)
A class of nonlinear recognition procedures, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-2**, 101—109 (December 1966).
Чоу (Chow C. K.)
Tree dependence in normal distributions, presented at the 1970 International Symposium on Information Theory, Noordwjik, The Netherlands (June 1970).
Чоу, Лю (Chow C. K., Liu C. N.)
Approximating discrete probability distributions with dependence trees, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 462—467 (May 1968).
Чоу, Лю (Chow C. K., Liu C. N.)
An approach to structure adaptation in pattern recognition, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-2**, 73—80 (December 1966).

Задачи

1. Пусть $p(x) \sim N(\mu, \sigma^2)$ и $\varphi(x) \sim N(0, 1)$. Покажнте, что оценка окна Парзена

$$p_n(x) = \frac{1}{nh_n} \sum_{i=1}^{n} \varphi\left(\frac{x - x_i}{h_n}\right)$$

обладает следующими свойствами:

а) $\bar{p}_n(x) \sim N(\mu, \sigma^2 + h_n^2)$;

б) $\mathrm{Var}[p_n(x)] \approx \frac{1}{nh_n 2\sqrt{\pi}}\, p(x)$;

в) $p(x) - \bar{p}_n(x) \approx \frac{1}{2}\left(\frac{h_n}{\sigma}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] p(x)$ для небольшого h_n. (*Замечание*: если $h_n = h_1/\sqrt{n}$, то это показывает, что ошибка, вызванная смещением, стремится к нулю как $1/n$, в то время как стандартное отклонение шума стремится к нулю только как $1/n^{0{,}25}$.)

2. Пусть $p(x)$ распределена равномерно от 0 до a, и пусть $\varphi(x) = e^{-x}$, если $x > 0$, и 0, если $x \leqslant 0$. Покажите, что среднее значение оценки окна Парзена задается соотношением

$$\bar{p}_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \frac{1}{a}\left(1 - e^{-x/h_n}\right), & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ \frac{1}{a}\left(e^{a/h_n} - 1\right) e^{-x/h_n}, & a < x. \end{cases}$$

Нарисовать график фуикции $\bar{p}_n(x)$ от x для $h_n = a$, $a/4$ и $a/16$. Насколько малой должна быть h_n, чтобы смещение было менее одного процента при 99%-ном размахе $0 < x < a$?

3. Пусть $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$ — множество n независимых помеченных выборок и $\mathcal{X}_k(\mathbf{x}) = \{\mathbf{x}_1', \ldots, \mathbf{x}_k'\}$ — k ближайших соседей $\mathbf{x}$. Правило k ближайших соседей

для классификации $\mathbf{x}$ заключается в присвоении $\mathbf{x}$ метки, наиболее часто представляемой в $\mathscr{X}_k(\mathbf{x})$. Рассмотрим задачу с двумя классами с $P(\omega_1)=P(\omega_2)=1/2$. Допустим далее, что условные плотности $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ однородны в единичных гиперсферах, расположенных на расстоянии десяти единиц друг от друга.

а) Покажите, что если k нечетное, то средняя вероятность ошибки задается посредством

$$P_n(e)=\frac{1}{2^n}\sum_{j=0}^{(k-1)/2}\binom{n}{j}.$$

б) Покажите, что для этого случая уровень ошибки у правила единственного ближайшего соседа будет ниже, чем у правила k ближайших соседей, $k>1$.

в) (Не обязательно.) Если k позволяется возрастать с ростом n, но оно ограничивается $k<a\sqrt{n}$, покажите, что $P_n(e)\to 0$ при $n\to\infty$.

4. Легко заметить, что уровень ошибки правила ближайшего соседа P может быть равным уровню Байеса P^*, если $P^*=0$ (наилучшая возможность) или если $P^*=(c-1)/c$ (наихудшая возможность). Может возникнуть вопрос, существуют ли задачи, для которых $P=P^*$, когда P^* находится между этими крайними возможностями.

а) Покажите, что уровень Байеса для одномерного случая, где $P(\omega_i)=1/c$ и

$$p(x\mid\omega_i)=\begin{cases}1, & 0\leqslant x\leqslant\dfrac{cr}{c-1},\\ 1, & i\leqslant x\leqslant i+1-\dfrac{cr}{c-1},\\ 0 & \text{в остальных случаях,}\end{cases}$$

будет $P^*=r$.

б) Покажите, что для этого случая $P=P^*$.

5. Рассмотрим множество из семи двумерных векторов $\mathbf{x}_1^t=(1\ 0)$, $\mathbf{x}_2^t=(0\ 1)$, $\mathbf{x}_3^t=(0\ -1)$, $\mathbf{x}_4^t=(0\ 0)$, $\mathbf{x}_5^t=(0\ 2)$, $\mathbf{x}_6^t=(0\ -2)$, $\mathbf{x}_7^t=(-2\ 0)$. Допустим, что первые три имеют метку ω_1, а другие четыре — метку ω_2.

а) Нарисуйте границу областей решений, полученную в результате применения правила ближайшего соседа. (Она должна состоять из девяти отрезков прямых.)

б) Найдите средние значения выборок $\mathbf{m}_1$ и $\mathbf{m}_2$ и нарисуйте границу решения, соответствующую классификации $\mathbf{x}$ при присваивании ему класса среднего значения ближайшей выборки.

6. Пусть $\varphi(x)\sim N(0,\ 1)$, и пусть

$$p_n(x)=\frac{1}{nh_n}\sum_{i=1}^{n}\varphi\left(\frac{x-x_i}{h_n}\right).$$

Аппроксимируйте эту оценку путем факторизации функции окна и разложения коэффициента e^{xx_i/h_n^2} в ряд Тейлора в начале координат.

а) Покажите, что при использовании нормированной переменной $u=x/h_n$, m-членная аппроксимация задается посредством

$$p_{nm}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,h_n}e^{-(1/2)u^2}\sum_{j=0}^{m-1}b_ju^j,$$

где

$$b_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{j!} u_i^j e^{-(1/2)u_i^2}.$$

б) Положим, что n выборок очень тесно сгруппированы вокруг $u=u_0$. Покажите, что двучленная аппроксимация имеет два локальных максимума в точках, где $u^2+u/u_0-1=0$. Покажите, что один максимум имеет место приблизительно при $u=u_0$, как и требуется, если $u_0 \ll 1$, но что он сдвигается только к $u=1$ для $u_0 \gg 1$. Нарисуйте кривую функции p_{n2} от u для $u_0=0{,}1$; 1 и 10.

7. Пусть $p_x(\mathbf{x}|\omega_i)$ будет произвольной плотностью со средним $\boldsymbol{\mu}_i$ и ковариационной матрицей Σ_i, $i=1$, 2. Пусть $y=\mathbf{w}^t\mathbf{x}$, и пусть индуцированная плотность $p_y(y|\omega_i)$ имеет среднее значение μ_i и дисперсию σ_i^2.

а) Покажите, что функция критерия

$$J_1(\mathbf{w}) = \frac{(\mu_1-\mu_2)^2}{\sigma_1^2+\sigma_2^2}$$

минимизируется посредством

$$\mathbf{w} = (\Sigma_1+\Sigma_2)^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2).$$

б) Если $P(\omega_i)$ есть априорная вероятность для ω_i, покажите, что

$$J_2(\mathbf{w}) = \frac{(\mu_1-\mu_2)^2}{P(\omega_1)\sigma_1^2+P(\omega_2)\sigma_2^2}$$

минимизируется посредством

$$\mathbf{w} = (P(\omega_1)\Sigma_1+P(\omega_2)\Sigma_2)^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2).$$

в) С какой из этих функций критерия теснее всего связано $J(\mathbf{w})$ из соотношения (70)?

8. Выражение

$$J_1 = \frac{1}{n_1 n_2}\sum_{y_i\in\mathcal{Y}_1}\sum_{y_j\in\mathcal{Y}_2}(y_i-y_j)^2$$

явно измеряет разброс между группами двух множеств выборок, из которых одно содержит n_1 выборок, помеченных ω_1, а другое содержит n_2 выборок, помеченных ω_2. Аналогично

$$J_2 = \frac{1}{n_1^2}\sum_{y_i\in\mathcal{Y}_1}\sum_{y_j\in\mathcal{Y}_1}(y_i-y_j)^2 + \frac{1}{n_2^2}\sum_{y_i\in\mathcal{Y}_2}\sum_{y_j\in\mathcal{Y}_2}(y_i-y_j)^2$$

явно измеряет полный разброс внутри групп.

а) Покажите, что

$$J_1 = (m_1-m_2)^2 + \frac{1}{n_1}s_1^2 + \frac{1}{n_2}s_2^2$$

и

$$J_2 = \frac{1}{n_1}s_1^2 + \frac{1}{n_2}s_2^2.$$

б) Если $y=\mathbf{w}^t\mathbf{x}$, покажите, что $\mathbf{w}$, минимизирующее J_1, при наложенном ограничении $J_2=1$ задается посредством

$$\mathbf{w} = \lambda\left(\frac{1}{n_1}S_1+\frac{1}{n_2}S_2\right)^{-1}(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2),$$

где

$$\lambda=(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t\left(\frac{1}{n_1}S_1+\frac{1}{n_2}S_2\right)^{-1}(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2),$$

$$\mathbf{m}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i}\mathbf{x}$$

и

$$S_i=\sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t.$$

9. Пользуясь определением матрицы разброса между группами, данным для случая многих классов:

$$S_B=\sum_{i=1}^{c}n_i(\mathbf{m}_i-\mathbf{m})(\mathbf{m}_i-\mathbf{m})^t,$$

покажите, что

$$S_B=[(n_1n_2)/n](\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t,$$

если $c=2$.

10. Если S_B и S_W являются любыми вещественными симметричными матрицами размера $d\times d$, то хорошо известно, что существует множество n собственных значений $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, удовлетворяющих $|S_B-\lambda_iS_W|=0$, и что существует соответствующее множество n собственных векторов $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$, удовлетворяющих равенству $S_B\mathbf{e}_i=\lambda_iS_W\mathbf{e}_i$. Далее, если S_W — положительно определенная матрица, собственные векторы можно всегда нормировать таким образом, что

$$\mathbf{e}_i^tS_W\mathbf{e}_j=\delta_{ij}$$

и

$$\mathbf{e}_i^tS_B\mathbf{e}_j=\lambda_i\delta_{ij}.$$

Пусть $\tilde{S}_W=W^tS_WW$ и $\tilde{S}_B=W^tS_BW$, где W — матрица размера $d\times n$, столбцы которой соответствуют n различным собственным векторам.

а) Покажите, что $\tilde{S}_W$ есть единичная матрица размера $n\times n$ и что $\tilde{S}_B$ — диагональная матрица, элементы которой суть соответствующие собственные значения [1]).

б) Каково значение $J=|\tilde{S}_B|/|\tilde{S}_W|$?

в) Пусть $\mathbf{y}=W^t\mathbf{x}$ преобразуется сначала масштабированием осей, что описывается невырожденной диагональной матрицей D размера $n\times n$ и последующим вращением, описываемым ортогональной матрицей Q: $\mathbf{y}'=QD\mathbf{y}$. Покажите, что J инвариантна относительно этого преобразования.

---

[1]) Это показывает, что разделяющие функции в множественном дискриминантном анализе не коррелированы.

Глава 5

ЛИНЕЙНЫЕ РАЗДЕЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ

5.1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 3 предполагалось, что вид рассматриваемых распределений вероятностей известен, и с помощью выборок производилась оценка их параметров. В данной главе известным будет считаться вид *разделяющих функций*, и выборки будут использоваться для оценки значений параметров классификаторов. Исследованию подлежат различные процедуры, применяемые для определения разделяющих функций, имеющие как статистический, так и нестатистический характер. Однако ни для одной из них не требуется, чтобы был известен вид рассматриваемых распределений вероятностей, и в этом смысле все их можно считать непараметрическими.

В данной главе будут рассматриваться разделяющие функции, линейные либо по компонентам вектора $\mathbf{x}$, либо по некоторому данному множеству функций от $\mathbf{x}$. Линейные разделяющие функции наиболее удобны с точки зрения аналитического исследования. Как было показано в гл. 2, они могут быть оптимальными, если рассматриваемые распределения согласованы. Даже когда они не оптимальны, может быть следует пренебречь некоторыми качествами ради выигрыша в простоте.

Вычислительный процесс значительно упрощается при использовании линейных разделяющих функций, и классификатор определенной структуры представляется наиболее подходящим средством для реализации в качестве машины специального назначения.

Линейный дискриминант Фишера является моделью в принятом нами подходе. Задача определения линейной разделяющей функции будет сформулирована как задача минимизации некоторой функции критерия. Вполне оправданным является использование *выборочного риска* в качестве критерия для задач классификации, т. е. средних потерь при классификации множества конструктивных выборок. Однако поскольку получение линейного дискриминанта, дающего минимальный риск, представляется достаточно трудным, в данной главе будет исследовано несколько аналогичных функций критерия, имеющих более простые аналитические выражения. Наибольшее внимание уделяется исследованию сходимости различных процедур градиентного спуска для минимизации этих функций. Сходство многих процедур иногда затрудняет выделение очевидных раз-

личий между ними. По этой причине в изложение материала включена сводка основных результатов, данная в табл. 5.1 в конце разд. 5.10.

5.2. ЛИНЕЙНЫЕ РАЗДЕЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ И ПОВЕРХНОСТИ РЕШЕНИЙ

5.2.1. СЛУЧАЙ ДВУХ КЛАССОВ

Разделяющая функция, представляемая линейной комбинацией компонент вектора $\mathbf{x}$, может быть записана в следующем виде:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^t\mathbf{x} + w_0, \tag{1}$$

где $\mathbf{w}$ называется *весовым вектором*, а w_0 — *величиной порога*. В основу линейного классификатора для двух классов положено следующее решающее правило: принять решение ω_1, если $g(\mathbf{x})>0$, и ω_2, если $g(\mathbf{x})<0$. Таким образом, $\mathbf{x}$ приписывается к ω_1, если скалярное произведение $\mathbf{w}^t\mathbf{x}$ превышает порог $-w_0$. Если $g(\mathbf{x})=0$, то обычно $\mathbf{x}$ можно отнести к любому из классов, однако в данной главе это соответствие будет считаться неопределенным.

Уравнение $g(\mathbf{x})=0$ определяет поверхность решений, отделяющую точки, соответствующие решению ω_1, от точек, соответствующих решению ω_2. Когда функция $g(\mathbf{x})$ линейна, данная поверхность представляется *гиперплоскостью*. Если и $\mathbf{x}_1$, и $\mathbf{x}_2$ принадлежат поверхности решений, то справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{w}^t\mathbf{x}_1 + w_0 = \mathbf{w}^t\mathbf{x}_2 + w_0,$$

или

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = 0,$$

так что $\mathbf{w}$ есть нормаль по отношению к любому вектору, лежащему в гиперплоскости. В общем случае гиперплоскость H делит пространство признаков на два полупространства: область решений $\mathcal{R}_1$ для ω_1 и область решений $\mathcal{R}_2$ для ω_2. Поскольку $g(\mathbf{x})>0$, если $\mathbf{x}$ находится в области $\mathcal{R}_1$, то из этого следует, что нормальный вектор $\mathbf{w}$ направлен в сторону $\mathcal{R}_1$. В этом случае иногда говорят, что любой вектор $\mathbf{x}$, находящийся в области $\mathcal{R}_1$, лежит на положительной стороне гиперплоскости H, а любой вектор $\mathbf{x}$, находящийся в области $\mathcal{R}_2$, лежит на отрицательной стороне H.

Разделяющая функция $g(\mathbf{x})$ представляет собой алгебраическое расстояние от $\mathbf{x}$ до гиперплоскости. Это становится более очевидным, если выразить $\mathbf{x}$ в следующем виде:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|},$$

где $\mathbf{x}_p$ — нормальная проекция $\mathbf{x}$ на гиперплоскость H, а r — соответствующее алгебраическое расстояние, положительное, если $\mathbf{x}$ находится с положительной стороны гиперплоскости, и отрица-

тельное, если $\mathbf{x}$ находится с отрицательной стороны гиперплоскости. Тогда, поскольку $g(\mathbf{x}_p)=0$,

$$g(\mathrm{x}) = \mathbf{w}^t\mathbf{x} + w_0 = r \| \mathbf{w} \|,$$

или

$$r = \frac{g(\mathrm{x})}{\| \mathbf{w} \|}.$$

В частности, расстояние от начала координат до гиперплоскости H выражается отношением $w_0/\|\mathbf{w}\|$. Если $w_0<0$, начало координат находится с положительной стороны H; если $w_0<0$,— с отрицательной стороны H. Если $w_0=0$, то функция $g(\mathrm{x})$ становится одно-

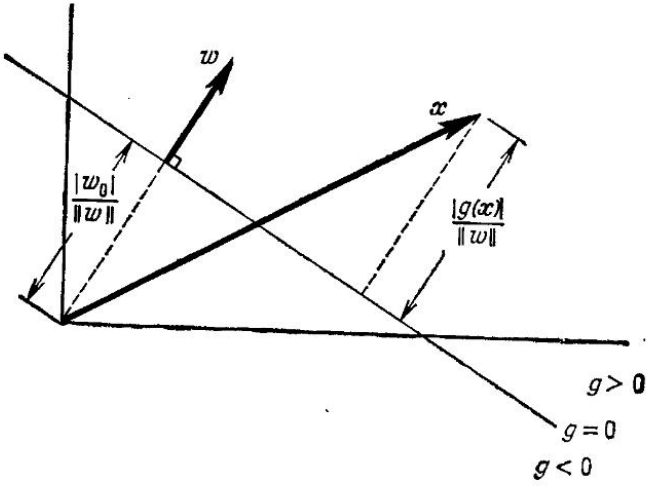


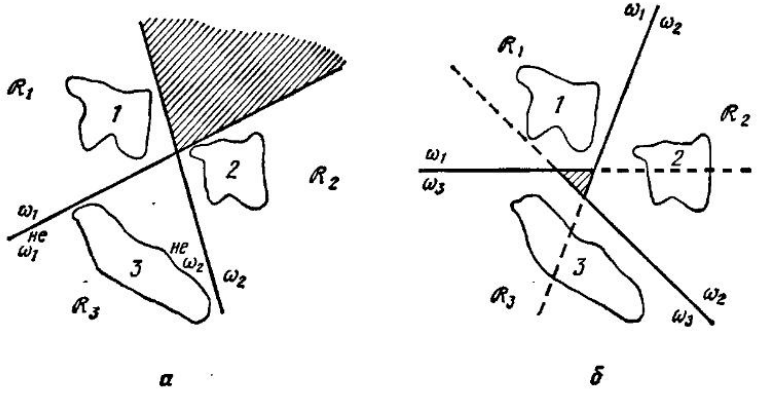
Рис. 5.1. Линейная граница областей решений $g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t\mathrm{x}+w_0=0$.

родной $\mathbf{w}^t\mathbf{x}$, и гиперплоскость проходит через начало координат. Геометрическая интерпретация данных результатов приведена на рис. 5.1.

В заключение можно сделать вывод, что линейная разделяющая функция делит пространство признаков поверхностью решений, представляющей собой гиперплоскость. Способ ориентации данной поверхности задается нормальным вектором $\mathbf{w}$, а положение ее — величиной порога w_0. Разделяющая функция $g(\mathbf{x})$ пропорциональна взятому со знаком расстоянию от $\mathbf{x}$ до гиперплоскости, при этом $g(\mathbf{x})>0$, когда $\mathbf{x}$ находится с положительной стороны гиперплоскости, и $g(\mathbf{x})<0$, когда $\mathbf{x}$ находится с отрицательной стороны.

5.2.2. СЛУЧАЙ МНОГИХ КЛАССОВ

Существует немало способов создания классификаторов для многих классов, основанных на использовании линейных разделяющих функций. Например, можно свести задачу к c—1 задачам для двух классов, где решением i-й задачи служит линейная разделяющая функция, определяющая границу между точками, соответствующими решению ω_i, и точками, не соответствующими решению ω_i. При ином подходе следовало бы использовать $c(c-1)/2$ линейных разделяющих функций, по одному для каждой пары классов. Как показано на рис. 5.2, оба эти подхода могут приводить к обла-



а *б*

Рис. 5.2. Линейные границы областей решений для задачи трех классов.
а — дихотомия ω_i/не ω_i, *б* — дихотомия ω_i/ω_j.

стям, аналогичным представленным здесь заштрихованными областями, в которых классификация не определена. При данном исследовании указанная трудность будет исключена в результате использования подхода, принятого в гл. 2, при котором определяется c линейных разделяющих функций вида

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^t \mathbf{x} + w_{i0}, \quad i = 1, \ldots, c, \tag{2}$$

и $\mathbf{x}$ приписывается к ω_i, если $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x})$ для всех $j \neq i$; в случае равенства классификация остается неопределенной. Получаемый таким путем классификатор называется *линейной машиной*. Линейная машина делит пространство признаков на области решений, при этом $g_i(\mathbf{x})$ является наибольшей из разделяющих функций, если $\mathbf{x}$ находится в области $\mathcal{R}_i$. Если области $\mathcal{R}_i$ и $\mathcal{R}_j$ соприкасающиеся, то границей между ними будет часть гиперплоскости H_{ij}, определяемая следующим соотношением:

$$g_i(\mathbf{x}) = g_j(\mathbf{x}),$$

или

$$(\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j)^t \mathbf{x} + (w_{i0} - w_{j0}) = 0.$$

Из этого сразу же следует, что вектор $\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j$ нормален гиперплоскости H_{ij}, а взятое со знаком расстояние от x до H_{ij} выражается отношением $(g_i - g_j)/\|(\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j)\|$. Таким образом, в случае использования линейной машины важны не сами векторы веса, а их *разности*. При наличии $c(c-1)/2$ пар областей не требуется, чтобы все они были соприкасающимися, и общее число участков гиперплоскостей, входящих в поверхности решения, часто может быть менее чем $c(c-1)/2$. Примеры двумерных случаев для таких поверхностей представлены на рис. 5.3.

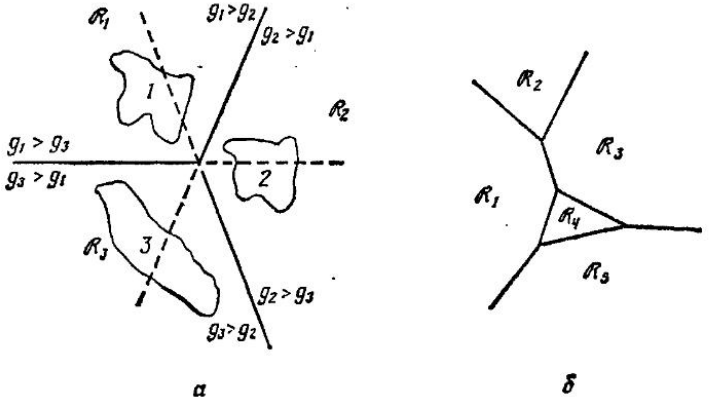


Рис. 5.3. Границы областей решений, полученные с помощью линейной машины. *а* — задача для трех классов, *б* — задача для пяти классов.

Легко показать, что области решений для линейной машины являются выпуклыми. Данное ограничение определенно снижает возможности классификатора. В частности, каждая область решения должна быть односвязной; это делает линейную машину в наибольшей мере соответствующей задачам, для которых условная плотность $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ унимодальна. В рамках этих ограничений линейная машина представляет собой достаточно гибкую конструкцию, допускающую простое аналитическое исследование.

5.3. ОБОБЩЕННЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ РАЗДЕЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ

Линейная разделяющая функция $g(\mathbf{x})$ может быть записана в следующем виде:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i, \tag{3}$$

где коэффициенты w_i являются компонентами весового вектора **w**. Добавив в это уравнение члены, содержащие произведения двух

компонент вектора $\mathbf{x}$, получим *квадратичную разделяющую функцию*

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} w_{ij} x_i x_j.$$

Не нарушая общности, можно положить $w_{ij} = w_{ji}$, поскольку $x_i x_j = x_j x_i$. Таким образом, в формулу квадратичной разделяющей функции входят $d(d+1)/2$ дополнительных коэффициентов; это позволяет получать более сложные разделяющие поверхности. Разделяющая поверхность, определяемая уравнением $g(\mathbf{x})=0$, является поверхностью второго порядка, или *гиперквадрикой*. Если симметричная матрица $W=[w_{ij}]$ невырожденна, то линейные члены в $g(\mathbf{x})$ могут быть исключены путем преобразования системы координат, и основное свойство разделяющей поверхности может быть описано с помощью масштабированной матрицы $\overline{W} = W/(\mathbf{w}^t W^{-1}\mathbf{w} - 4w_0)$. Если матрица $\overline{W}$ является положительным кратным единичной матрицы, разделяющая поверхность будет *гиперсферой*. Если $\overline{W}$ — положительно определенная матрица, то разделяющая поверхность — *гиперэллипсоид*. Если некоторые характеристические числа матрицы $\overline{W}$ положительны, а другие отрицательны, то поверхность является одним из *гипергиперболоидов*. Как было отмечено в гл. 2, это все виды разделяющих поверхностей, которые появляются в общем случае многомерного нормального распределения.

Продолжая вводить дополнительные члены, такие, как $w_{ijk} x_i x_j x_k$, можно получить класс *полиномиальных разделяющих функций*. Указанные функции можно рассматривать как усеченные разложения в ряд некоторой произвольной функции $g(\mathbf{x})$, что в свою очередь ведет к представлению об *обобщенных линейных разделяющих функциях*, имеющих следующий вид:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i y_i(\mathbf{x}), \tag{4}$$

или

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^t \mathbf{y}, \tag{5}$$

где $\mathbf{a}$ есть $\hat{d}$-мерный весовой вектор, а $\hat{d}$ функций $y_i(\mathbf{x})$ (иногда называемых φ-функциями) могут быть произвольными функциями от $\mathbf{x}$. Выбирая указанные функции соответствующим образом и полагая $\hat{d}$ достаточно большим, можно аппроксимировать любую заданную разделяющую функцию таким разложением в ряд. Полученная разделяющая функция нелинейна относительно $\mathbf{x}$, однако линейна относительно $\mathbf{y}$. Отображение точек d-мерного пространства $\mathbf{x}$ в $\hat{d}$-мерное пространство $\mathbf{y}$ осуществляют $\hat{d}$ функций $y_i(\mathbf{x})$. Однородная разделяющая функция $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$ разделяет точки в данном отображенном пространстве посредством гиперплоскости, проходящей через на-

чало координат. Таким образом, переход от $\mathbf{x}$ к $\mathbf{y}$ сводит задачу к определению однородной линейной разделяющей функции.

Некоторые преимущества и недостатки данного подхода можно продемонстрировать на простом примере. Пусть $g(x)$ будет квадратичной разделяющей функцией

$$g(x)=a_1+a_2x+a_3x^2,$$

так что трехмерный вектор $\mathbf{y}$ задается матрицей

$$\mathbf{y}=\begin{bmatrix}1\\ x\\ x^2\end{bmatrix}.$$

Переход от x к $\mathbf{y}$ показан на рис. 5.4. Данные, по существу, остаются одномерными, поскольку изменение x соответствует появлению кривой в трехмерном пространстве $\mathbf{y}$. Таким образом, отсюда сразу

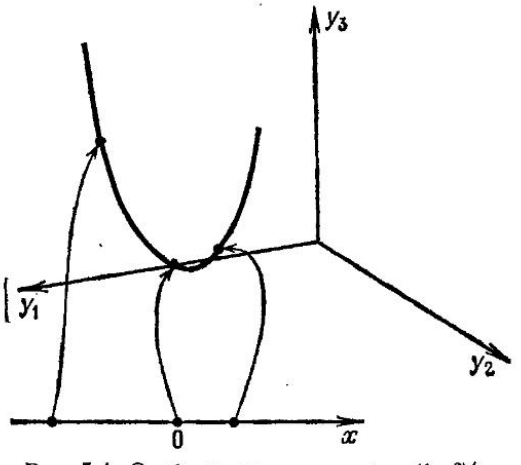


Рис. 5.4. Отображение в случае $\mathbf{y}=(1\,x\,x^2)^t$.

вытекает тот факт, что, если x подчиняется вероятностному закону $p(x)$, отображенная функция плотности $\hat{p}(\mathbf{y})$ становится вырожденной, обращаясь в нуль везде, кроме кривой, где она принимает бесконечно большие значения.

Приведенный пример представляет собой общую задачу, возникающую в случае, когда $\hat{d}>d$, и отображение точек происходит из пространства с меньшей размерностью в пространство с большей размерностью.

Плоскость $\hat{H}$, определяемая уравнением $\mathbf{a}^t\mathbf{y}=0$, делит пространство $\mathbf{y}$ на две области решений: $\hat{\mathcal{R}}_1$ и $\hat{\mathcal{R}}_2$. На рис. 5.5 показана разделяющая плоскость, определяемая вектором $\mathbf{a}=(-1\ 1\ 2)^t$, и соответствующие области решений $\mathcal{R}_1$ и $\mathcal{R}_2$ в пространстве $\mathbf{x}$. Квадратич-

ная разделяющая функция $g(x)=-1+x+2x^2$ положительна, если $x<-1$ или если $x>0{,}5$, так что область $\mathcal{R}_1$ является многосвязной. Таким образом, хотя области решений в y-пространстве выпуклые, это отнюдь не обязательно имеет место в x-пространстве. Даже при наличии сравнительно простых функций $y_i(\mathbf{x})$ поверхности решений, отображенные в x-пространство, могут быть весьма сложными.

К сожалению, «проклятие размерности» усложняет практическое использование возможностей классификатора. Полная квадратичная разделяющая функция включает $\hat{d}=(d+1)(d+2)/2$ членов. Если d сравнительно велико, скажем $d=50$, то требуется вы-

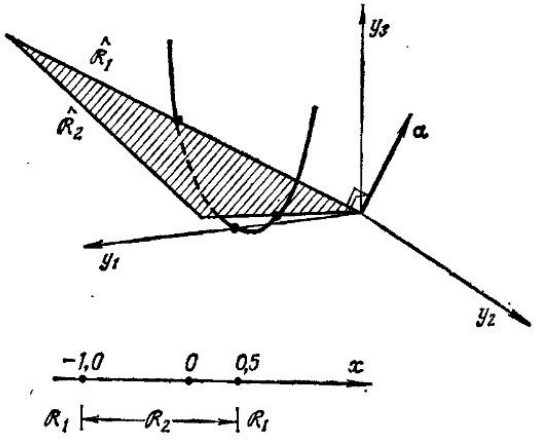


Рис. 5.5. Области решений в x-пространстве и y-пространстве.

числение большого числа членов. Включение кубичных членов и членов с более высоким порядком приводит к еще большим значениям $\hat{d}$. Более того, $\hat{d}$ компонент весового вектора **a** должны определяться из выборок. Если $\hat{d}$ придается смысл числа степеней свободы разделяющей функции, то естественным будет требование, чтобы число выборок было не меньше, чем это число степеней свободы. Очевидно, что в случае общего разложения в ряд функции $g(\mathbf{x})$ можно легко прийти к совершенно нереальным требованиям в отношении процесса вычислений и необходимых данных.

В случае обобщенной линейной разделяющей функции, хотя и трудно реализовать ее потенциальные преимущества, по крайней мере достигается удобство записи $g(\mathbf{x})$ в виде однородной функции $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$. В частном случае линейной разделяющей функции вида

$$g(\mathbf{x})=w_0+\sum_{i=1}^{d} w_i x_i \qquad (3)$$

можно написать

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} \tag{6}$$

и

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ w_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \tag{7}$$

Данный переход от d-мерного пространства $\mathbf{x}$ к $(d+1)$-мерному пространству $\mathbf{y}$ с математической точки зрения тривиален и тем не менее достаточно удобен. Добавление постоянной компоненты к $\mathbf{x}$ не нарушает соотношений в расстояниях между выборками. Все получаемые векторы $\mathbf{y}$ лежат в d-мерном подпространстве, являющемся самим $\mathbf{x}$-пространством. Определяемая соотношением $\mathbf{a}^t\mathbf{y}=0$ гиперплоскость поверхности решений $\hat{H}$ всегда проходит через начало координат $\mathbf{y}$-пространства, несмотря на то что соответствующая гиперплоскость H может располагаться в $\mathbf{x}$-пространстве произвольным образом. Расстояние от $\mathbf{y}$ до $\hat{H}$ выражается отношением $|\mathbf{a}^t\mathbf{y}|/||\mathbf{a}||$, или $|g(\mathbf{x})|/||\mathbf{a}||$. Поскольку $||\mathbf{a}|| > ||\mathbf{w}||$, то данное расстояние меньше или в лучшем случае равно расстоянию от $\mathbf{x}$ до H. При использовании указанного отображения задача нахождения весового вектора $\mathbf{w}$ и величины порога w_0 сводится к определению одного весового вектора $\mathbf{a}$.

5.4. СЛУЧАЙ ДВУХ ЛИНЕЙНО РАЗДЕЛИМЫХ КЛАССОВ

5.4.1. ГЕОМЕТРИЯ И ПРИНЯТАЯ ТЕРМИНОЛОГИЯ

Предположим теперь, что имеется множество n выборок $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$, часть которых помечена ω_1, а часть ω_2. Данные выборки мы хотели бы использовать для определения весов в линейной разделяющей функции $g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^t\mathbf{y}$. Предположим, имеется основание считать, что существует решение, для которого вероятность ошибки очень и очень мала. Тогда разумный подход будет заключаться в нахождении весового вектора, который правильно классифицировал бы все выборки. Если такой весовой вектор существует, то выборки называются *линейно разделяемыми*.

Выборка $\mathbf{y}_i$ классифицируется правильно, если $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i > 0$ и $\mathbf{y}_i$ помечен ω_1 или если $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i < 0$ и $\mathbf{y}_i$ помечен ω_2. Можно заметить, что во втором случае $\mathbf{y}_i$ будет классифицироваться правильно, если

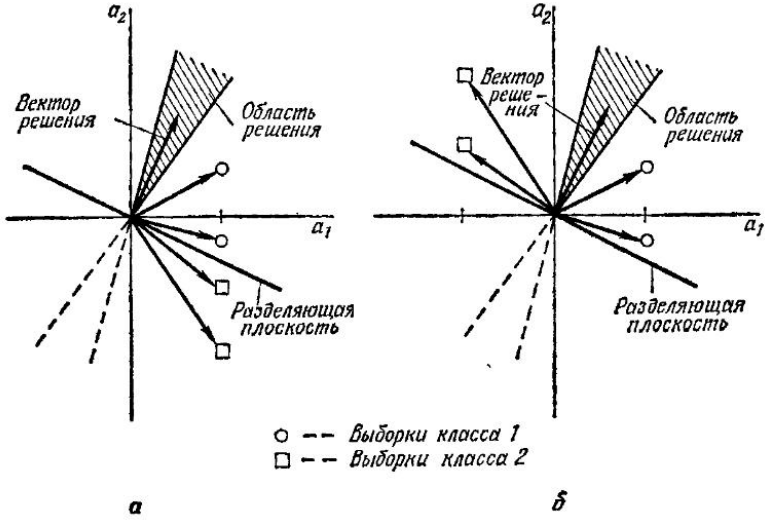


Рис. 5.6. Линейно разделяемые выборки и область решения в весовом пространстве.
а — случай с нормированием, *б* — случай без нормирования.

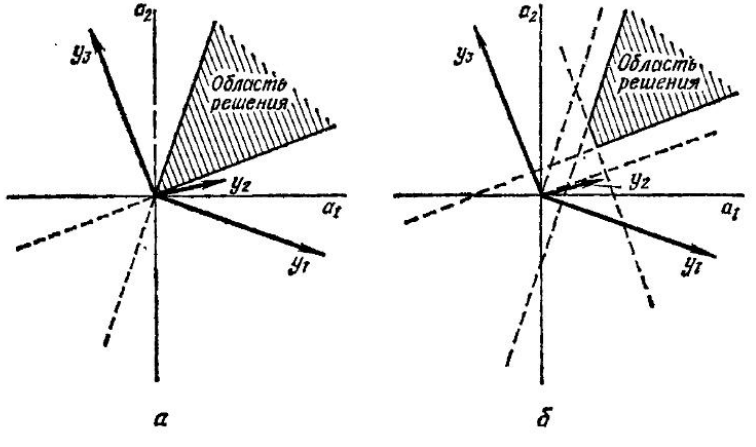


Рис. 5.7. Влияние допуска на область решения.
а — случай $b=0$, *б* — случай $b=\|y_2\|^2$.

$\mathbf{a}^t(-\mathbf{y}_i)>0$. Это наводит на мысль о введении нормирования, с помощью которого будет упрощено рассмотрение случая двух классов, а именно будет произведена замена всех выборок, обозначенных символом ω_2, их отрицаниями. При введении указанного нормирования можно забыть об индексах и искать такой весовой вектор $\mathbf{a}$, чтобы для всех выборок выполнялось соотношение $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i>0$. Данный весовой вектор называется *разделяющим вектором* или *вектором решения*.

Можно считать, что весовой вектор $\mathbf{a}$ определяет точку в *весовом пространстве*. Каждая выборка $\mathbf{y}_i$ накладывает ограничение на возможное расположение вектора решения. Уравнение $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i=0$ определяет гиперплоскость, проходящую через начало координат в весовом пространстве, для которой $\mathbf{y}_i$ является нормальным вектором. Вектор решения, если он существует, должен находиться с положительной стороны каждой гиперплоскости.

Таким образом, вектор решения должен лежать в пересечении n полупространств, и любой вектор, находящийся в данной области, будет являться вектором решения. Соответствующая область называется *областью решений*. На рис. 5.6 изображена область решений при нормировании и без нормирования на примере двумерного случая.

Из сказанного следует, что если существует вектор решения, то он не единствен. Дополнительные ограничения на вектор решения можно получить разными способами. Одна из возможностей заключается в поиске единичного вектора, который бы максимизировал минимальное расстояние от выборок до разделяющей плоскости. Другим способом является нахождение минимального весового вектора, удовлетворяющего условию $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i\geqslant b$ для всех i, где b — положительная константа, называемая *допуском*. Иногда бывает удобным, чтобы выполнялось лишь условие $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i\geqslant b$. Как показано на рис. 5.7, область решений, получившаяся в результате пересечения полупространств, для которых $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i\geqslant b>0$, находится внутри прежней области и отделена от старых границ расстоянием $b/\|\mathbf{y}_i\|$. Попытки определения вектора решения, расположенного ближе к «середине» области решения, основывались на интуитивном предположении, что полученное решение с большей вероятностью будет давать правильную классификацию новых выборок. Однако в случаях, подлежащих рассмотрению, для нас удовлетворительным будет любое решение, принадлежащее области решения. Основное внимание должно быть сосредоточено на том, чтобы любая используемая итеративная процедура не вызывала приближения к предельной точке, лежащей на границе. Данная задача всегда может быть решена путем введения допуска, т. е. выполнением требования $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i\geqslant b>0$ для всех i.

5.4.2. ПРОЦЕДУРЫ, ОСНОВАННЫЕ НА МЕТОДЕ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

Метод, используемый для нахождения решения системы линейных неравенств $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i>0$, состоит в определении функции критерия $J(\mathbf{a})$, которая минимизируется при условии, что $\mathbf{a}$ является вектором решения. Данный подход сводит рассматриваемую задачу к минимизации скалярной функции, что часто можно осуществить при помощи процедуры градиентного спуска. Принцип процедуры спуска очень прост. Она начинается с выбора некоторого произвольного весового вектора $\mathbf{a}_1$ и вычисления градиентного вектора $\nabla J(\mathbf{a}_1)$. Следующее значение $\mathbf{a}_2$ получается при смещении на некоторое расстояние относительно вектора $\mathbf{a}_1$ в направлении наискорейшего спуска, т. е. вдоль отрицательного градиента. В общем случае $\mathbf{a}_{k+1}$ получают из $\mathbf{a}_k$ по алгоритму

$$\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k-\rho_k\nabla J(\mathbf{a}_k), \tag{8}$$

где ρ_k есть положительный скалярный коэффициент, определяющий величину шага. По-видимому, такая последовательность весовых векторов должна сходиться к решению, минимизирующему функцию $J(\mathbf{a})$.

Известно, что с процедурами градиентного спуска связан целый ряд проблем. В нашем случае мы сможем уйти от наиболее серьезных из этих проблем, поскольку сами будем конструировать функции, которые хотим минимизировать. Единственное, с чем мы столкнемся неоднократно, это выбор скалярного коэффициента ρ_k. Если коэффициент ρ_k очень мал, наблюдается слишком медленная сходимость; если ρ_k слишком велик, то процесс коррекций даст перерегулирование и может оказаться даже расходящимся. Предположим, что функция критерия может быть достаточно точно аппроксимирована разложением второго порядка:

$$J(\mathbf{a})\approx J(\mathbf{a}_k)+\nabla J^t(\mathbf{a}-\mathbf{a}_k)+\frac{1}{2}(\mathbf{a}-\mathbf{a}_k)^t D(\mathbf{a}-\mathbf{a}_k), \tag{9}$$

где D является матрицей частных производных второго порядка $\partial^2 J/\partial a_i\partial a_j$, вычисленных при условии $\mathbf{a}=\mathbf{a}_k$. Тогда, используя $\mathbf{a}_{k+1}$, взятое из соотношений (8) и (9), можно получить следующее выражение:

$$J(\mathbf{a}_{k+1})\approx J(\mathbf{a}_k)-\rho_k\|\nabla J\|^2+\frac{1}{2}\rho_k^2\nabla J^t D\nabla J,$$

из чего следует, что функцию $J(\mathbf{a}_{k+1})$ можно минимизировать, выбрав

$$\rho_k=\frac{\|\nabla J\|^2}{\nabla J^t D\nabla J}. \tag{10}$$

Другую процедуру спуска можно получить, если, не используя (8), выбирать $\mathbf{a}_{k+1}$, минимизирующее это разложение второго порядка. Это приводит к *алгоритму Ньютона*, имеющему вид:

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - D^{-1}\nabla J. \tag{11}$$

Вообще говоря, один шаг алгоритма Ньютона обычно более эффективен, нежели шаг алгоритма простого градиентного спуска даже при оптимальном значении ρ_k. Однако если матрица D вырожденна, то алгоритм Ньютона неприменим. Более того, даже при условии, что матрица D невырожденна, потери времени, связанные с ее обращением, могут легко свести на нет указанные преимущества. Фактически зачастую небходимость сделать несколько лишних коррекций, если в качестве ρ_k взято заниженное значение ρ, приводит к меньшим затратам времени, чем вычисление оптимального ρ_k на каждом шаге. В дальнейшем еще придется вернуться ко всем этим вопросам.

5.5. МИНИМИЗАЦИЯ ПЕРСЕПТРОННОЙ ФУНКЦИИ КРИТЕРИЯ

5.5.1. ПЕРСЕПТРОННАЯ ФУНКЦИЯ КРИТЕРИЯ

Рассмотрим теперь задачу определения функции критерия для решения линейных неравенств вида $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i > 0$. Проще всего взять в качестве функции $J(\mathbf{a}; \mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n)$ число выборок, классифицируемых с ошибкой посредством $\mathbf{a}$. Однако, поскольку данная функция является кусочно постоянной, очевидно, что она будет плохо соответствовать задаче градиентного анализа. Лучшим вариантом является *функция персептрона*

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} (-\mathbf{a}^t\mathbf{y}), \tag{12}$$

где $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ — множество выборок, *классифицируемых с ошибкой* посредством $\mathbf{a}$. (Если выборок, классифицируемых с ошибкой, нет, то J_p полагается равной нулю.) Так как $\mathbf{a}^t\mathbf{y} \leqslant 0$, если $\mathbf{y}$ классифицируется с ошибкой, то функция $J_p(\mathbf{a})$ не может быть отрицательной. Она достигает нулевого значения, когда $\mathbf{a}$ является вектором решения или же находится на границе области решений. Геометрически функция $J_p(\mathbf{a})$ пропорциональна сумме расстояний от выборок, классифицируемых с ошибкой, до границы области решений. На рис. 5.8 изображена функция J_p для простого двумерного случая.

Поскольку j-я компонента градиента J_p выражается в виде частной производной $\partial J_p/\partial a_j$, из формулы (12) следует, что

$$\nabla J_p = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} (-\mathbf{y}),$$

и при этом основной алгоритм (8) приводится к следующему виду:

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_k} \mathbf{y}, \tag{13}$$

где $\mathcal{Y}_k$ есть множество выборок, классифицируемых с ошибкой посредством $\mathbf{a}_k$. Таким образом, процедуру спуска для нахождения вектора решения можно определить очень просто: следующий ве-

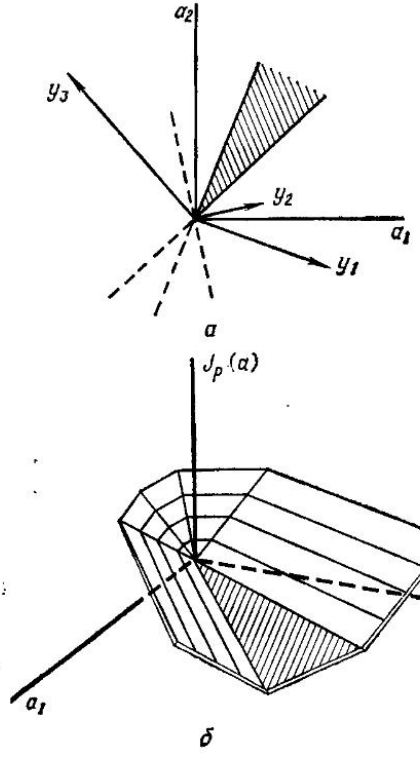


Рис. 5.8. Персептронная функция критерия. *а*— весовое пространство, *б*— функция критерия.

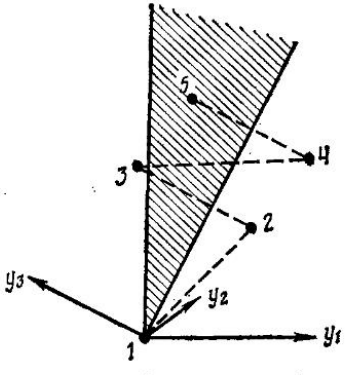


Рис. 5.9. Определение области решения методом градиентного анализа.

совой вектор получается путем прибавления к данному весовому вектору некоторого кратного суммы выборок, классифицируемых с ошибкой. На рис. 5.9 приведен пример определения вектора решения с помощью указанного алгоритма для простого двумерного случая при значениях $\mathbf{a}_1 = 0$ и $\rho_k = 1$. Покажем теперь, что данный алгоритм будет давать решение для любой задачи с линейно разделяемым множеством.

5.5.2. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СХОДИМОСТИ ДЛЯ СЛУЧАЯ КОРРЕКЦИИ ПО ОДНОЙ ВЫБОРКЕ

Исследование сходимости алгоритма спуска удобно начать с варианта, более легкого для анализа. Вместо определения $\mathbf{a}_k$ по всем выборкам и осуществления коррекции по множеству классифицируемых с ошибкой выборок $\mathcal{Y}_k$ выборки будут рассматриваться последовательно, и весовой вектор будет изменяться всякий раз, когда некоторая выборка будет классифицироваться с ошибкой. Для доказательства сходимости подробная характеристика данной последовательности неважна, коль скоро каждая выборка появляется в последовательности бесконечно большое число раз. Наиболее просто убедиться в этом, повторяя выборки циклически.

Два последующих упрощения помогут лучшему пониманию излагаемого материала. Во-первых, временно ограничимся случаем, когда ρ_k является константой. Это так называемый случай с *постоянным приращением*. Из соотношения (13) следует, что если ρ_k — величина постоянная, то она служит лишь для масштабирования выборок. Таким образом, в случае с постоянным приращением можно, без ущерба для общности, положить $\rho_k=1$. Второе упрощение состоит лишь в введении обозначений. Когда выборки рассматриваются последовательно, некоторые из них классифицируются с ошибкой. Поскольку весовой вектор изменяют лишь при наличии ошибки, внимание фактически сосредоточивается только на выборках, классифицируемых с ошибкой. Таким образом, последовательность выборок обозначается через $\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \ldots, \mathbf{y}^k, \ldots$, где каждый $\mathbf{y}^k$ является одной из n выборок $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$ и каждая выборка $\mathbf{y}^k$ классифицируется с ошибкой. Например, при циклическом повторении выборок $\mathbf{y}_1$, $\mathbf{y}_2$ и $\mathbf{y}_3$, если отмеченные выборки

$$\check{\mathbf{y}}_1, \mathbf{y}_2, \check{\mathbf{y}}_3, \check{\mathbf{y}}_1, \check{\mathbf{y}}_2, \mathbf{y}_3, \mathbf{y}_1, \check{\mathbf{y}}_2, \ldots$$

классифицируются с ошибкой, то последовательность $\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \mathbf{y}^3, \mathbf{y}^4, \mathbf{y}^5, \ldots$ обозначает последовательность $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_3, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_2, \ldots$. Исходя из данного объяснения, для образования последовательности весовых векторов может быть записано *правило постоянного приращения*:

$$\left.\begin{array}{ll} \mathbf{a}_1 & \text{произвольно,} \\ \mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\mathbf{y}^k, & k\geqslant 1, \end{array}\right\} \tag{14}$$

где $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k\leqslant 0$ для всех k.

Правило постоянного приращения является простейшим из числа многих алгоритмов, которые предлагались для решения систем линейных неравенств. Впервые оно появилось при введении схемы обучения с подкреплением, предложенной Ф. Розенблаттом для его персептронной модели мозга и доказательства сходимости последней, известного под названием *теоремы сходимости персептрона*.

В частности, можно дать ее геометрическую интерпретацию в весовом пространстве. Поскольку вектор $\mathbf{a}_k$ классифицирует $\mathbf{y}^k$ с ошибкой, то $\mathbf{a}_k$ не будет находиться с положительной стороны $\mathbf{y}^k$, принадлежащего гиперплоскости $\mathbf{a}^t\mathbf{y}^k=0$. Прибавление $\mathbf{y}^k$ к вектору $\mathbf{a}_k$ смещает весовой вектор непосредственно в направлении к данной гиперплоскости при возможности ее пересечения (рис. 5.10). Независимо от того, пересечется ли гиперплоскость или нет, новое скалярное произведение $\mathbf{a}_{k+1}^t\mathbf{y}^k$ будет больше прежнего произведения

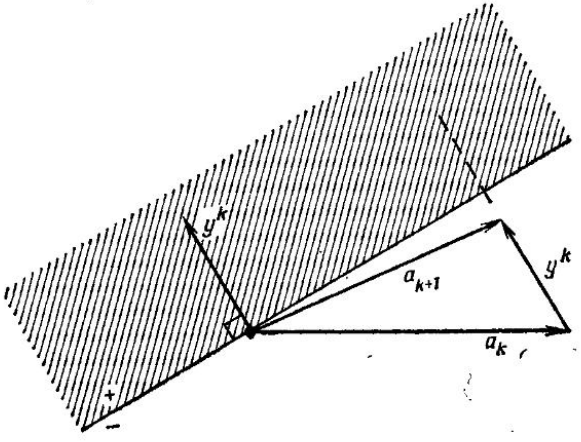


Рис. 5.10. Шаг, соответствующий правилу постоянного приращения.

$\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k$ на величину $\|\mathbf{y}^k\|^2$, в результате получаем, что вследствие коррекции весовой вектор смещается в нужном направлении.

Покажем теперь, что, если выборки линейно разделяемы, последовательность весовых векторов будет ограничиваться вектором решения. При доказательстве необходимо отметить, что каждая процедура коррекции сдвигает весовой вектор ближе к области решения. То есть следует показать, что если $\hat{\mathbf{a}}$ является любым вектором решения, то значение $\|\mathbf{a}_{k+1}-\hat{\mathbf{a}}\|$ меньше значения $\|\mathbf{a}_k-\hat{\mathbf{a}}\|$. Хотя в общем случае данное утверждение оказывается несправедливым, будет показано, что оно выполняется для векторов решения, имеющих достаточную длину.

Пусть $\hat{\mathbf{a}}$ — вектор решения, так что величина $\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i$ строго положительна для всех i, а α — положительный скалярный коэффициент. Из соотношения (14) следует, что

$$(\mathbf{a}_{k+1}-\alpha\hat{\mathbf{a}})=(\mathbf{a}_k-\alpha\hat{\mathbf{a}})+\mathbf{y}^k;$$

тогда

$$\|\mathbf{a}_{k+1}-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2=\|\mathbf{a}_k-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2+2(\mathbf{a}_k-\alpha\hat{\mathbf{a}})^t\mathbf{y}^k+\|\mathbf{y}^k\|^2.$$

Поскольку $\mathbf{y}^k$ классифицировался с ошибкой, то $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant 0$, и, таким образом, можно записать следующее выражение:

$$\| \mathbf{a}_{k+1} - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 \leqslant \| \mathbf{a}_k - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 - 2\alpha\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}^k + \| \mathbf{y}^k \|^2.$$

Так как величина $\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}^k$ строго положительна, второй член будет по модулю превосходить третий при условии, что значение α достаточно велико. В частности, если положить

$$\beta^2 = \max_i \| \mathbf{y}_i \|^2 \tag{15}$$

и

$$\gamma = \min_i \hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i > 0, \tag{16}$$

то

$$\| \mathbf{a}_{k+1} - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 \leqslant \| \mathbf{a}_k - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 - 2\alpha\gamma + \beta^2,$$

и если выбрать

$$\alpha = \frac{\beta^2}{\gamma}, \tag{17}$$

то получим следующее выражение:

$$\| \mathbf{a}_{k+1} - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 \leqslant \| \mathbf{a}_k - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 - \beta^2.$$

Таким образом, квадрат расстояния от $\mathbf{a}_k$ до $\alpha\hat{\mathbf{a}}$ при каждой коррекции будет уменьшаться, по крайней мере на величину β^2, и после k коррекций представится в следующем виде:

$$\| \mathbf{a}_{k+1} - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 \leqslant \| \mathbf{a}_1 - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2 - k\beta^2.$$

Поскольку величина квадрата расстояния не может быть отрицательной, из этого следует, что последовательность коррекций должна быть ограничена числом коррекций, не большим чем k_0, где

$$k_0 = \frac{\| \mathbf{a}_1 - \alpha\hat{\mathbf{a}} \|^2}{\beta^2}. \tag{18}$$

Поскольку коррекция осуществляется всякий раз, когда выборка классифицируется с ошибкой, и поскольку каждая выборка появляется бесконечно большое число раз в последовательности, отсюда следует, что после прекращения процесса коррекций полученный весовой вектор должен правильно осуществлять классификацию всех выборок.

Число k_0 определяет предельное значение числа коррекций. Если $\mathbf{a}_1 = 0$, получается следующее достаточно простое выражение для k_0:

$$k_0 = \frac{\alpha^2 \| \hat{\mathbf{a}} \|^2}{\beta^2} = \frac{\beta^2 \| \hat{\mathbf{a}} \|^2}{\gamma^2} = \frac{\max_i \| \mathbf{y}_i \|^2 \| \hat{\mathbf{a}} \|^2}{\min_i [\mathbf{y}_i^t\hat{\mathbf{a}}]^2}. \tag{19}$$

Данное выражение показывает, что трудность задачи в основном определяется наличием выборок, наиболее близких к ортогональным по отношению к вектору решения. К сожалению, указанное выражение невозможно использовать при рассмотрении нерешеиной задачи, поскольку в данном случае граница должна определяться исходя из неизвестного вектора решения. Очевидно, что в общем случае задачи с линейно разделяемыми множествами могут представлять известные трудности для определения решения в условиях компланарности выборок. Тем не менее, если выборки линейно разделяемы, правило постоянного приращения будет давать решение после конечного числа коррекций.

5.5.3. НЕКОТОРЫЕ НЕПОСРЕДСТВЕННЫЕ ОБОБЩЕНИЯ

Правило постоянного приращения можно обобщить с целью выделения связанных между собой алгоритмов. Коротко будут рассмотрены два наиболее интересных варианта. В первом варианте вводится понятие *переменного приращения* ρ_k и допуск b и предусматривается коррекция, когда величина $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k$ является недостаточной для превышения допуска. Алгоритм задается в следующем виде:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 && \text{произвольно,}\\ &\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\rho_k\mathbf{y}^k, && k\geqslant 1, \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

где теперь $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k\leqslant b$ для всех k. Можно показать, что, если выборки линейно разделяемы и если

$$\rho_k\geqslant 0, \tag{21}$$

$$\lim_{m\to\infty}\sum_{k=1}^{m}\rho_k=\infty \tag{22}$$

и

$$\lim_{m\to\infty}\frac{\sum_{k=1}^{m}\rho_k^2}{\left(\sum_{k=1}^{m}\rho_k\right)^2}=0, \tag{23}$$

$\mathbf{a}_k$ сходится к вектору решения $\mathbf{a}$, удовлетворяющему условию $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i>b$ при всех значениях i. В частности, условия, налагаемые на ρ_k, выполняются в том случае, если ρ_k является положительной константой или убывает как $1/k$.

Следующим вариантом, представляющим интерес, является первоначально рассмотренный алгоритм градиентного спуска для J_p:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 && \text{произвольно,}\\ &\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\rho_k\sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{Y}_k}\mathbf{y}, \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

где $\mathcal{Y}_k$ — множество выборок, классифицируемых с ошибкой посредством $\mathbf{a}_k$. Легко видеть, что данный алгоритм будет также давать решение, принимая во внимание, что если $\hat{\mathbf{a}}$ является вектором решения для последовательности $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$, то он правильно классифицирует корректирующий вектор

$$\mathbf{y}^k = \sum_{y \in \mathcal{Y}_k} \mathbf{y}.$$

Таким образом, если выборки являются линейно разделяемыми, то все возможные виды корректирующих векторов составляют линейно разделяемое множество, и если ρ_k удовлетворяет соотношениям (21) — (23), то последовательность весовых векторов, получаемая посредством алгоритма градиентного спуска для J_p, всегда будет сходиться к вектору решения.

Интересно заметить, что условия, налагаемые на ρ_k, удовлетворяются в тех случаях, когда ρ_k является положительной константой и когда ρ_k убывает как $1/k$ или даже возрастает с ростом k. Вообще говоря, предпочтение следует отдавать ρ_k, уменьшающемуся с течением времени. Это замечание становится особенно существенным, когда есть основание считать, что множество выборок линейно неразделяемо, поскольку в данном случае уменьшается отрицательное влияние нескольких «плохих» выборок. Однако то, что в случае разделяемых выборок при увеличении ρ_k получение решения оказывается все же возможным, кажется довольно странным.

Из данного наблюдения вытекает одно из различий между теоретическим и практическим взглядами на эту проблему. С теоретической точки зрения представляется интересным тот факт, что решение можно получить при наличии конечного числа шагов в случае любого ограниченного множества разделяемых выборок, при любом начальном весовом векторе $\mathbf{a}_1$, при любом неотрицательном значении допуска b и при любом скалярном коэффициенте ρ_k, удовлетворяющем соотношениям (21) — (23). С практической точки зрения желательно производить разумный выбор указанных величин. Рассмотрим, например, допуск b. Если b намного меньше $\rho_k\|\mathbf{y}^k\|^2$, т. е. той величины, на которую возрастает $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k$ в результате коррекции, то очевидно, что b будет оказывать совсем малое влияние. Если b намного превосходит величину $\rho_k\|\mathbf{y}^k\|^2$, то потребуется большое число коррекций, чтобы добиться выполнения условия $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k > b$. Часто в качестве компромиссного подхода используют величину, близкую к $\rho_k\|\mathbf{y}^k\|^2$. Кроме указанных вариантов выбора ρ_k и b, большое влияние на результат может оказывать масштабирование компонент вектора $\mathbf{y}^k$. Наличие теоремы сходимости не избавляет от необходимости сознательного подхода при использовании данных методик.

5.6. ПРОЦЕДУРЫ РЕЛАКСАЦИЙ

5.6.1. АЛГОРИТМ СПУСКА

Функция критерия $J_p(\mathbf{a})$ отнюдь не представляется единственной функцией, которую можно построить с целью минимизации в случае, когда $\mathbf{a}$ является вектором решения. Близким, но имеющим отличие представляется выражение вида

$$J_q(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} (\mathbf{a}^t \mathbf{y})^2, \tag{25}$$

где $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ опять обозначает множество выборок, классифицируемых с ошибкой посредством $\mathbf{a}$. Так же как и в случае функции J_p, основное внимание при использовании функции J_q сосредоточивается на выборках, классифицируемых с ошибкой. Главное различие указанных функций состоит в том, что градиент функции J_q является непрерывным, в то время как градиент функции J_p таким свойством не обладает. К сожалению, функция J_q настолько сглажена вблизи границы области решений, что последовательность весовых векторов может сходиться к точке, лежащей на границе. Особое неудобство связано с некоторыми затратами времени, требующимися для определения градиента вблизи граничной точки $\mathbf{a}=\mathbf{0}$. Другая неприятность, связанная с функцией J_q, состоит в том, что величина данной функции может быть превышена за счет наиболее длинных векторов выборок. Обе эти трудности можно обойти путем применения функции критерия [1]) следующего вида:

$$J_r(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} \frac{(\mathbf{a}^t \mathbf{y} - b)^2}{\|\mathbf{y}\|^2}, \tag{26}$$

где $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ теперь обозначает множество выборок, для которых $\mathbf{a}^t\mathbf{y} \leqslant b$. (Если $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ определяет пустое множество, то полагаем J_r равной нулю.) Таким образом, функция $J_r(\mathbf{a})$ никогда не бывает отрицательной и обращается в нуль в том и только том случае, если $\mathbf{a}^t(\mathbf{y}) \geqslant b$ для всех выборок. Градиент функции J_r задается выражением

$$\nabla J_r = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} \frac{\mathbf{a}^t \mathbf{y} - b}{\|\mathbf{y}\|^2} \mathbf{y},$$

---

[1]) Нормирование посредством введения $\|\mathbf{y}\|^2$ упрощает выбор ρ_k. Фактически производится выбор $\rho_k = 1$, соответствующего оптимальному значению, определяемому соотношением (10). Данный вопрос исследуется в дальнейшем в задаче 13.

так что основной алгоритм спуска представляется в следующем виде:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 \quad \text{произвольно,} \\ &\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\rho_k \sum_{y\in \mathcal{Y}_k} \frac{b-\mathbf{a}^t\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|^2}\mathbf{y}. \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

Как и раньше, будем считать, что более простое доказательство сходимости получается при условии, что выборки рассматриваются поодиночке, а не все сразу. Ограничимся также случаем, когда $\rho_k=\rho$. Таким образом, можно опять перейти к рассмотрению последовательности $\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \ldots$, образованной из выборок, требующихся для коррекции весовых векторов. Правило коррекции по одной выборке аналогично соотношению (27) и записывается в виде

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 \quad \text{произвольно,} \\ &\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\rho \frac{b-\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|^2}\mathbf{y}^k, \end{aligned}\right\} \tag{28}$$

где $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant b$ для всех k.

Данный алгоритм известен под названием *правила релаксаций* и имеет простую геометрическую интерпретацию. Величина

$$r_k=\frac{b-\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$$

представляет собой расстояние от $\mathbf{a}_k$ до гиперплоскости $\mathbf{a}^t\mathbf{y}^k=b$. Поскольку отношение $\mathbf{y}^k/\|\mathbf{y}^k\|$ определяет единичный нормальный вектор для данной гиперплоскости, то $\mathbf{a}_k$, содержащееся в уравнении (28), должно смещаться на некоторую часть ρ этого расстояния от $\mathbf{a}_k$ к гиперплоскости. Если $\rho=1$, то $\mathbf{a}_k$ смещается точно до гиперплоскости, так что происходит «релаксация (ослабление — *ред.*) напряжения», вызваиного неравенством $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant b$. После коррекции по формуле (28) получаем

$$(\mathbf{a}_{k+1}^t\mathbf{y}^k-b)=(1-\rho)(\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k-b).$$

Если $\rho<1$, то произведение $\mathbf{a}_{k+1}^t\mathbf{y}^k$ остается все же меньшим, чем b; если же $\rho>1$, то $\mathbf{a}_{k+1}^t\mathbf{y}^k$ будет больше b. Данные условия носят название *недорелаксация* и *перерелаксация* соответственно. Обычно ρ выбирается из интервала $0<\rho<2$.

5.6.2. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СХОДИМОСТИ

При применении правила релаксаций к множеству линейно разделяемых выборок число коррекций может быть ограниченным или неограниченным. Если число коррекций ограничено, то, естественно, получаем вектор решения. Если число коррекций не огра-

ничено, то будет показано, что $\mathbf{a}_k$ сходится к предельному вектору, лежащему на границе области решений. Поскольку область, в которой $\mathbf{a}^t\mathbf{y} \geqslant b$, включена в бóльшую область, где $\mathbf{a}^t\mathbf{y} > 0$ при $b > 0$, это означает, что $\mathbf{a}_k$ войдет в эту бóльшую область по меньшей мере один раз, в конечном счете оставаясь в этой области при всех k, бóльших некоторого конечного k_0.

Доказательство связано с тем фактом, что если $\hat{\mathbf{a}}$ представляет собой *любой* вектор, лежащий в области решений, т. е. удовлетворяющий условию $\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i > b$ при всех i, то с каждым шагом вектор $\mathbf{a}_k$ приближается к вектору $\hat{\mathbf{a}}$. Данное утверждение сразу же следует из соотношения (28), поскольку

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \hat{\mathbf{a}}\|^2 = \|\mathbf{a}_k - \hat{\mathbf{a}}\|^2 - 2\rho \frac{(b - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k)}{\|\mathbf{y}^k\|^2} (\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}_k)^t\mathbf{y}^k + \rho^2 \frac{(b - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k)^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}$$

и

$$(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}_k)^t\mathbf{y}^k > b - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \geqslant 0,$$

так что

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \hat{\mathbf{a}}\|^2 \leqslant \|\mathbf{a}_k - \hat{\mathbf{a}}\|^2 - \rho(2 - \rho) \frac{(b - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k)^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}.$$

Поскольку ρ изменяется в интервале $0 < \rho < 2$, из этого вытекает, что $\|\mathbf{a}_{k+1} - \hat{\mathbf{a}}\| \leqslant \|\mathbf{a}_k - \hat{\mathbf{a}}\|$. Таким образом, векторы последовательности $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots$ все более приближаются к $\hat{\mathbf{a}}$, и в пределе, когда k стремится к бесконечности, величина расстояния $\|\mathbf{a}_k - \hat{\mathbf{a}}\|$ будет близка к некоторому предельному значению $r(\hat{\mathbf{a}})$. Отсюда следует, что при стремлении k к бесконечности $\mathbf{a}_k$ располагается на поверхности гиперсферы с центром $\hat{\mathbf{a}}$ и радиусом $r(\hat{\mathbf{a}})$. Поскольку данное утверждение справедливо для любого $\hat{\mathbf{a}}$, находящегося в области решений, предельное $\mathbf{a}_k$ лежит на пересечении гиперсфер, центрами которых являются все возможные векторы решений.

Покажем, что общим пересечением данных гиперсфер является единственная точка, лежащая на границе области решений. Предположим сначала, что существуют по крайней мере две точки $\mathbf{a}'$ и $\mathbf{a}''$, принадлежащие общему пересечению. Тогда выполняется равенство $\|\mathbf{a}' - \hat{\mathbf{a}}\| = \|\mathbf{a}'' - \hat{\mathbf{a}}\|$ для каждого $\hat{\mathbf{a}}$, находящегося в области решений. Но это означает, что область решений располагается в $(\hat{d}-1)$-мерной гиперплоскости, содержащей точки, равноудаленные от $\mathbf{a}'$ и $\mathbf{a}''$, тогда как известно, что область решений является $\hat{d}$-мерной. (Точная формулировка такова: если $\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i > 0$ при $i = 1, \ldots, n$, то для любого d-мерного вектора $\mathbf{v}$ справедливым будет выражение $(\hat{\mathbf{a}} + \varepsilon\mathbf{v})^t\mathbf{y}_i > 0$ для $i = 1, \ldots, n$ при условии, что ε достаточно мало.) Таким образом, $\mathbf{a}_k$ сходится к единственной точке $\mathbf{a}$. Указанная точка, конечно, не находится внутри области решений, ибо тогда после-

довательность была бы конечной. Она также не находится и вне данной области, поскольку в результате каждой коррекции вектор веса смещается на величину ρ, умноженную на его расстояние до граничной плоскости, так что навсегда фиксированного минимально возможного расстояния, на которое вектор может приближаться к границе, не существует. Отсюда следует, что предельная точка должна лежать на границе.

5.7. ПОВЕДЕНИЕ ПРОЦЕДУР В СЛУЧАЕ НЕРАЗДЕЛЯЕМЫХ МНОЖЕСТВ

Процедура, основанная на правиле постоянного приращения, и процедура релаксаций дают ряд простых методов для нахождения разделяющего вектора в случае линейно разделяемых выборок. Все эти методы называются *процедурами коррекции ошибок*, поскольку они вызывают изменение весового вектора в том и только том случае, когда появляется ошибка. Успех указанных процедур обусловлен в основном именно методичным поиском безошибочного решения. На практике возможность использования этих методов следует рассматривать только в том случае, если можно считать, что уровень ошибки для оптимальных линейных разделяющих функций мал.

Конечно, даже в случае, когда можно найти разделяющий вектор на основании конструктивных выборок, не следует предполагать, что полученный классификатор будет хорошо справляться с независимыми проверочными данными. В гл. 3 мы исходили из того, что *любое* множество, содержащее число выборок, меньшее, чем $2\hat{d}$, вероятно, будет линейно разделяемым. Таким образом, несколькими способами используя большое число конструктивных выборок, чтобы переопределить классификатор, мы бы гарантировали хорошее соответствие его работы на конструктивных и проверочных данных. К сожалению, достаточно большое конструктивное множество почти наверняка не будет линейно разделяемым. Поэтому важно знать, как себя ведут процедуры коррекции ошибок в случае неразделяемых выборок.

Поскольку в условиях неразделяемых множеств невозможно посредством весового вектора правильно классифицировать каждую выборку, очевидно, что процесс коррекции ошибок может никогда не прекратиться. Каждый алгоритм образует бесконечную последовательность весовых векторов, где любой член может как давать, так и не давать нужного решения. Точное поведение указанных процедур при наличии неразделяемых множеств было строго исследовано только в нескольких специальных случаях. Известно, например, что длина весовых векторов, образованных с помощью правила постоянного приращения, ограничена. Правила, определяющие окончание процедуры коррекции, полученные эмпирическим путем, часто основываются на тенденции длины весовых векто-

ров колебаться около некоторого предельного значения. С теоретической точки зрения при целочисленных компонентах выборок процедура, основанная на использовании правила постоянного приращения, приводит к конечному процессу. Если процесс коррекций заканчивается в некоторой произвольной точке, вектор веса может находиться, а может и не находиться в надлежащем положении. Усредняя весовые векторы, образованные в результате применения правила коррекций, можно уменьшить риск получения плохого решения из-за случайно неудачно выбранного момента окончания процесса коррекций.

Был предложен и изучен на практике ряд подобных эвристических модификаций для правил коррекции ошибок. Цель этих модификаций состоит в получении приемлемых характеристик для задач с неразделяемыми множествами при сохранении возможности определения разделяющего вектора для задач с разделяемыми множествами. В качестве общего подхода может быть предложено использование переменного приращения ρ_k, которое стремится к нулю при $k \to \infty$. Скорость, с которой ρ_k приближается к нулю, является весьма важным фактором. Если скорость слишком мала, результаты будут оставаться зависящими от тех выборок, которые делают множество неразделяемым. Если скорость слишком велика, то вектор веса может сходиться слишком быстро, и процесс закончится до того, как будут достигнуты оптимальные результаты. Один из способов выбора ρ_k состоит в представлении его в виде функции нового показателя качества, убывающей по мере улучшения данного показателя. Другой путь выбора ρ_k — это задание его в виде $\rho_k = \rho_1/k$. Когда мы будем изучать методы стохастической аппроксимации, то увидим, что последний способ выбора ρ_k представляет собой теоретическое решение аналогичной задачи. Однако прежде, чем обратиться к данной теме, рассмотрим подход, при котором жертвуют возможностью получения разделяющего вектора, с целью достижения нужного компромисса между обеими задачами — как с разделяемыми, так и с неразделяемыми множествами.

5.8. ПРОЦЕДУРЫ МИНИМИЗАЦИИ КВАДРАТИЧНОЙ ОШИБКИ

5.8.1. МИНИМАЛЬНАЯ КВАДРАТИЧНАЯ ОШИБКА И ПСЕВДООБРАЩЕНИЕ

В случае ранее рассмотренных функций критерия внимание в основном было сфокусировано на выборках, классифицируемых с ошибкой. Теперь будет рассмотрена функция критерия, включающая все выборки. Там, где прежде осуществлялся предварительный поиск весового вектора $\mathbf{a}$, приводящего к положительным значениям все скалярные произведения $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i$, теперь попытаемся получить $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i = b_i$, где b_i являются произвольно заданными положительными

константами. Таким образом, задача нахождения решения системы линейных неравенств заменяется более строгой, но более понятной задачей определения решения системы линейных уравнений.

Вид системы линейных уравнений упрощается, если ввести матричные обозначения. Пусть Y — матрица размера $n \times \hat{d}$, i-я строка которой является вектором $\mathbf{y}_i^t$, и пусть $\mathbf{b}$ — вектор-столбец $\mathbf{b}=(b_1, \ldots, b_n)^t$. Тогда наша задача сводится к определению весового вектора $\mathbf{a}$, удовлетворяющего уравнению

$$Y\mathbf{a}=\mathbf{b}. \tag{29}$$

Если бы матрица Y была невырожденной, то можно было бы записать равенство $\mathbf{a}=Y^{-1}\mathbf{b}$ и сразу же получить формальное решение. Однако Y является прямоугольной матрицей, у которой число строк обычно превышает число столбцов. Когда уравнений больше, чем неизвестных, вектор $\mathbf{a}$ определен избыточно, и обычно точного решения не существует. Однако можно искать весовой вектор $\mathbf{a}$, минимизирующий некоторую функцию разности между $Y\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$. Если определить вектор ошибки $\mathbf{e}$ как

$$\mathbf{e}=Y\mathbf{a}-\mathbf{b}, \tag{30}$$

то данный подход будет состоять в минимизации квадрата длины вектора ошибки. Данная операция эквивалентна задаче минимизации функции критерия, выражаемой суммой квадратичных ошибок:

$$J_s(\mathbf{a}) = \| Y\mathbf{a}-\mathbf{b} \|^2 = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i - b_i)^2. \tag{31}$$

Задача минимизации суммы квадратичных ошибок является классической. Как будет показано в п. 5.8.4, она может быть решена методом градиентного анализа. Простое решение в замкнутой форме можно также получить, образуя градиент

$$\nabla J_s = \sum_{i=1}^{n} 2(\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i - b_i)\mathbf{y}_i = 2Y^t(Y\mathbf{a}-\mathbf{b})$$

и полагая его равным нулю. Отсюда получается необходимое условие

$$Y^tY\mathbf{a}=Y^t\mathbf{b}, \tag{32}$$

и задача решения уравнения $Y\mathbf{a}=\mathbf{b}$ сводится к задаче решения уравнения $Y^tY\mathbf{a}=Y^t\mathbf{b}$. Большим достоинством этого замечательного уравнения является то, что матрица Y^tY размера $\hat{d} \times \hat{d}$ квадратная и часто невырожденная. Если данная матрица невырождена, вектор $\mathbf{a}$ может быть определен однозначно:

$$\mathbf{a} = (Y^tY)^{-1}Y^t\mathbf{b} = Y^\dagger\mathbf{b}, \tag{33}$$

где матрица размера $\hat{d} \times n$

$$Y^\dagger = (Y^tY)^{-1}Y^t \tag{34}$$

называется *псевдообращением* матрицы Y. Заметим, что если матрица Y квадратная и невырожденная, псевдообращение совпадает с обычным обращением. Следует также отметить, что $Y^{\dagger}Y=I$, но обычно $YY^{\dagger}\neq I$. Если матрица Y^tY вырождена, решение уравнения (32) не будет единственным. Однако решение, обеспечивающее минимальную квадратичную ошибку, существует всегда. В частности, при определении $Y^{\dagger}$ в более общем виде:

$$Y^{\dagger}=\lim_{\varepsilon\to 0}(Y^tY+\varepsilon I)^{-1}Y^t \tag{35}$$

можно показать, что данный предел всегда существует, и $\mathbf{a}=Y^{\dagger}\mathbf{b}$ является решением уравнения $Y\mathbf{a}=\mathbf{b}$, обеспечивающим наименьшую квадратичную ошибку. Указанные и другие интересные свойства псевдообращения подробно изложены в литературе.

Решение с наименьшей квадратичной ошибкой зависит от вектора допуска $\mathbf{b}$, и будет показано, что различные способы выбора $\mathbf{b}$ приводят к различным свойствам получаемого решения. Если вектор $\mathbf{b}$ задан произвольно, то нет оснований считать, что в случае линейно разделяемых множеств решение с наименьшей квадратичной ошибкой даст разделяющий вектор. Однако можно надеяться, что в случае как разделяемых, так и неразделяемых множеств в результате минимизации функции критерия квадратичной ошибки может быть получена нужная разделяющая функция. Теперь перейдем к исследованию двух свойств решения, подтверждающих данное утверждение.

5.8.2. СВЯЗЬ С ЛИНЕЙНЫМ ДИСКРИМИНАНТОМ ФИШЕРА

В данном пункте будет показано, что при соответствующем выборе вектора $\mathbf{b}$ разделяющая функция $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$, найденная по методу минимальной квадратичной ошибки, непосредственно связана с линейным дискриминантом Фишера. Для того чтобы показать это, следует вернуться к необобщенным линейным разделяющим функциям. Предположим, что имеется множество n d-мерных выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, причем n_1 из них принадлежат подмножеству $\mathcal{X}_1$, помеченному ω_1, а n_2 — подмножеству $\mathcal{X}_2$, помеченному ω_2. Далее положим, что выборка $\mathbf{y}_i$ образуется из $\mathbf{x}_i$ путем прибавления порогового компонента, равного единице, и умножением полученного вектора на -1 в случае выборки, помеченной ω_2. Не нарушая общности, можно положить, что первые n_1 выборок помечены ω_1, а последующие n_2 помечены ω_2. Тогда матрицу Y можно представить в следующем виде:

$$Y=\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1 & X_1\\ -\mathbf{u}_2 & -X_2\end{bmatrix},$$

где $\mathbf{u}_i$ является вектор-столбцом из n_i компонент, а X_i — матрицей размера $n_i \times d$, строками которой являются выборки, помеченные ω_i. Соответствующим образом разложим **a** и **b**:

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix}$$

и

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \frac{n}{n_1}\mathbf{u}_1 \\ \frac{n}{n_2}\mathbf{u}_2 \end{bmatrix}.$$

Можно показать, что при определенном выборе **b** обнаруживается связь между решением по методу наименьшей квадратичной ошибки и линейным дискриминантом Фишера.

Доказательство начнем, записав соотношение (32) для **a** с использованием разложенных матриц:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^t & -\mathbf{u}_2^t \\ X_1^t & -X_2^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & X_1 \\ -\mathbf{u}_2 & -X_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^t & -\mathbf{u}_2^t \\ X_1^t & -X_2^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{n}{n_1}\mathbf{u}_1 \\ \frac{n}{n_2}\mathbf{u}_2 \end{bmatrix}. \tag{36}$$

Определяя выборочное среднее $\mathbf{m}_i$ и матрицу суммарного выборочного разброса S_W:

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}, \quad i = 1, 2, \tag{37}$$

$$S_W = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^t, \tag{38}$$

можно в результате перемножения матриц, входящих в (36), получить следующее выражение:

$$\begin{bmatrix} n & (n_1\mathbf{m}_1 + n_2\mathbf{m}_2)^t \\ (n_1\mathbf{m}_1 + n_2\mathbf{m}_2) & S_W + n_1\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1^t + n_2\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ n(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) \end{bmatrix}.$$

Полученное выражение может рассматриваться как пара уравнений, причем из первого можно выразить w_0 через **w**:

$$w_0 = -\mathbf{m}^t\mathbf{w}, \tag{39}$$

где **m** является средним по всем выборкам. Подставив данное выражение во второе уравнение и выполнив некоторые алгебраические преобразования, получим

$$\left[\frac{1}{n} S_W + \frac{n_1 n_2}{n^2}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t\right] \mathbf{w} = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2. \tag{40}$$

Поскольку направление вектора $(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t\mathbf{w}$ при любом **w** совпадает с направлением вектора $\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$, то можно записать

следующее выражение:

$$\frac{n_1 n_2}{n^2}(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2)^t\mathbf{w}=(1-\alpha)(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2),$$

где α — некоторая скалярная величина. В этом случае соотношение (40) дает

$$\mathbf{w}=\alpha n S_{\overline{W}}^{-1}(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2), \tag{41}$$

что, за исключением скалярного коэффициента, идентично решению для случая линейного дискриминанта Фишера. Помимо этого, получаем величину порога w_0 и следующее решающее правило: принять решение ω_1, если $\mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{m})>0$; иначе принять решение ω_2.

5.8.3. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ К ОПТИМАЛЬНОМУ ДИСКРИМИНАНТУ

Другое свойство решения по методу наименьшей квадратичной ошибки, говорящее в его пользу, состоит в том, что при условии $\mathbf{b}=\mathbf{u}_n$ и при $n\to\infty$ оно в пределе приближается в смысле минимума среднеквадратичной ошибки к разделяющей функции Байеса

$$g_0(\mathbf{x})=P(\omega_1|\mathbf{x})-P(\omega_2|\mathbf{x}). \tag{42}$$

Чтобы продемонстрировать данное утверждение, следует предположить, что выборки взяты независимо в соответствии с вероятностным законом

$$p(\mathbf{x})=p(\mathbf{x}|\omega_1)P(\omega_1)+p(\mathbf{x}|\omega_2)P(\omega_2). \tag{43}$$

Решение по методу наименьшей квадратичной ошибки с использованием расширенного вектора $\mathbf{y}$ дает разложение в ряд функции $g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^t\mathbf{y}$, где $\mathbf{y}=\mathbf{y}(\mathbf{x})$. Если определить среднеквадратичную ошибку аппроксимации выражением

$$\varepsilon^2=\int[\mathbf{a}^t\mathbf{y}-g_0(\mathbf{x})]^2 p(\mathbf{x})\,d\mathbf{x}, \tag{44}$$

то нашей задачей будет показать, что величина ε^2 минимизируется посредством решения $\mathbf{a}=Y^{\dagger}\mathbf{u}_n$.

Доказательство упростится при условии сохранения различия между выборками класса 1 и класса 2. Исходя из ненормированных данных, функцию критерия J_s можно записать в виде

$$J_s(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{Y}_1}(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1)^2+\sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{Y}_2}(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1)^2=$$
$$=n\left[\frac{n_1}{n}\cdot\frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{Y}_1}(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1)^2+\frac{n_2}{n}\cdot\frac{1}{n_2}\sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{Y}_2}(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1)^2\right].$$

Таким образом, в соответствии с законом больших чисел при стремлении n к бесконечности $(1/n)J_s(\mathbf{a})$ приближается с вероятностью 1 к

функции $\bar{J}(\mathbf{a})$, имеющей вид

$$\bar{J}(\mathbf{a}) = P(\omega_1) E_1[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - 1)^2] + P(\omega_2) E_2[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} + 1)^2], \qquad (45)$$

где

$$E_1[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - 1)^2] = \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} - 1)^2 p(\mathbf{x} \mid \omega_1) d\mathbf{x}$$

и

$$E_2[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} + 1)^2] = \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} + 1)^2 p(\mathbf{x} \mid \omega_2) d\mathbf{x}.$$

Теперь, если мы из соотношения (42) определим

$$g_0(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}, \omega_1) - p(\mathbf{x}, \omega_2)}{p(\mathbf{x})},$$

то получим

$$\begin{aligned}\bar{J}(\mathbf{a}) &= \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} - 1)^2 p(\mathbf{x}, \omega_1) d\mathbf{x} + \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} + 1)^2 p(\mathbf{x}, \omega_2) d\mathbf{x} = \\ &= \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y})^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 2\int \mathbf{a}^t\mathbf{y} g_0(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + 1 = \\ &= \int [\mathbf{a}^t\mathbf{y} - g_0(\mathbf{x})]^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \left[1 - \int g_0^2(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}\right]. \qquad (46)\end{aligned}$$

Второй член данной суммы не зависит от весового вектора $\mathbf{a}$. Отсюда следует, что $\mathbf{a}$, которое минимизирует J_s, также минимизирует и ε^2 — среднеквадратичную ошибку между $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$ и $g_0(\mathbf{x})$.

Данный результат позволяет глубже проникнуть в суть процедуры, обеспечивающей решение по методу наименьшей квадратичной ошибки. Аппроксимируя $g_0(\mathbf{x})$, разделяющая функция $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$ дает непосредственную информацию относительно апостериорных вероятностей $P(\omega_1|\mathbf{x}) = 1/2(1+g_0)$ и $P(\omega_2|\mathbf{x}) = 1/2(1-g_0)$. Качество аппроксимации зависит от функций $y_i(\mathbf{x})$ и числа членов в разложении $\mathbf{a}^t\mathbf{y}$. К сожалению, критерий среднеквадратичной ошибки в основном распространяется не на точки, близкие к поверхности решения $g_0(\mathbf{x}) = 0$, а на точки, для которых значение $p(\mathbf{x})$ велико. Таким образом, разделяющая функция, которая наилучшим образом аппроксимирует разделяющую функцию Байеса, не обязательно минимизирует вероятность ошибки. Несмотря на данный недостаток, решение по методу наименьшей квадратичной ошибки обладает интересными свойствами и широко распространено в литературе. Далее, при рассмотрении методов стохастической аппроксимации, еще предстоит встретиться с задачей среднеквадратичной аппроксимации функции $g_0(\mathbf{x})$.

5.8.4. ПРОЦЕДУРА ВИДРОУ — ХОФФА

Ранее было отмечено, что функцию $J_s(\mathbf{a}) = \|Y\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2$ можно минимизировать при помощи процедуры градиентного спуска. У такого подхода есть два преимущества по сравнению с простым выполнением

псевдообращения: 1) не возникает трудностей в случае, когда матрица Y^tY вырождена, и 2) устраняется необходимость работы с большими матрицами. Кроме того, необходимые вычисления здесь с успехом реализуются схемой с обратной связью, которая автоматически справляется с некоторыми вычислительными трудностями, округляя или отбрасывая члены. Поскольку $\nabla J_s = 2Y^t(Y\mathbf{a}-\mathbf{b})$, то очевидно, что алгоритм спуска может быть представлен в следующем виде:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 \quad \text{произвольно,} \\ &\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \rho_k Y^t(Y\mathbf{a}_k - \mathbf{b}). \end{aligned}\right\}$$

Будет полезно убедиться, что если

$$\rho_k = \rho_1/k,$$

где ρ_1 — любая положительная константа, то с помощью данного правила можно образовать последовательность весовых векторов, которая сходится к предельному вектору $\mathbf{a}$, удовлетворяющему условию

$$Y^t(Y\mathbf{a}-\mathbf{b}) = 0.$$

Таким образом, алгоритм спуска всегда дает решение независимо от того, будет ли матрица Y^tY вырожденной или нет.

Несмотря на то что матрица Y^tY размера $\hat{d}\times\hat{d}$ обычно меньше матрицы $Y^\dagger$ размера $\hat{d}\times n$, сохранившиеся требования могут быть еще далее снижены при последовательном рассмотрении выборок и использовании *правила Видроу — Хоффа*, записанного в виде

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_1 \quad \text{произвольно,} \\ &\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k(b_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k)\,\mathbf{y}^k. \end{aligned}\right\} \tag{47}$$

На первый взгляд алгоритм спуска представляется таким же, как правило релаксаций. Однако главное их различие состоит в том, что правило релаксаций является правилом коррекции ошибок, так что $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k$ всегда меньше b_k, тогда как правило Видроу — Хоффа обеспечивает «коррекцию» вектора $\mathbf{a}_k$ всякий раз, когда $\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k$ не равно b_k. В большинстве случаев, представляющих интерес, невозможно удовлетворить всем равенствам $\mathbf{a}^t\mathbf{y}^k = b_k$, так что процесс коррекций будет непрекращающимся. Таким образом, для сходимости требуется, чтобы ρ_k уменьшалось вместе с k, выбор $\rho_k = \rho_1/k$ является типичным. Строгий анализ поведения правила Видроу — Хоффа для детерминированного случая довольно сложен и показывает лишь, что последовательность весовых векторов имеет тенденцию сходиться к требуемому решению. Вместо дальнейшего разбора этой темы обратимся к очень простому правилу, вытекающему из процедуры стохастического спуска.

5.8.5. МЕТОДЫ СТОХАСТИЧЕСКОЙ АППРОКСИМАЦИИ

Все итеративные процедуры спуска, рассмотренные ранее, были детерминированными: задавали некоторое множество выборок и образовывали вполне определенную последовательность весовых векторов. В данном пункте придется слегка отступить и рассмотреть процедуры решения по методу наименьшей квадратичной ошибки со случайно формируемыми выборками, что приводит к образованию случайной последовательности весовых векторов. Для полного анализа потребовалось бы использование теории стохастической аппроксимации, и мы бы с этим не справились. Однако основные идеи, которые можно дать без доказательства, просты.

Предположим, что выборки взяты независимо путем выделения состояний природы с вероятностью $P(\omega_i)$ и последующего выбора $\mathbf{x}$ в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\omega_i)$. Для каждого $\mathbf{x}$ введем *метку* z, такую, что $z=+1$ при $\mathbf{x}$, соответствующем ω_1, и $z=-1$ при $\mathbf{x}$, соответствующем ω_2. Тогда данные будут представлять собой бесконечную последовательность независимых пар $(\mathbf{x}_1, z_1)$, $(\mathbf{x}_2, z_2), \ldots, (\mathbf{x}_k, z_k), \ldots$.

Даже если метка z будет бинарной, это может быть истолковано как зашумленный вариант байесовской разделяющей функции $g_0(\mathbf{x})$. Данное утверждение вытекает из наблюдения, что

$$P(z=1|\mathbf{x})=P(\omega_1|\mathbf{x})$$

и

$$P(z=-1|\mathbf{x})=P(\omega_2|\mathbf{x}),$$

так что условное среднее для z задается выражением

$$E_{z|x}[z]=\sum_z zP(z|\mathbf{x})=P(\omega_1|\mathbf{x})-P(\omega_2|\mathbf{x})=g_0(\mathbf{x}). \tag{48}$$

Предположим, что требуется аппроксимировать $g_0(\mathbf{x})$ посредством следующего конечного разложения в ряд:

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^t\mathbf{y}=\sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i y_i(\mathbf{x}),$$

где известны как базисные функции $y_i(\mathbf{x})$, так и число членов $\hat{d}$. Тогда можно определить весовой вектор $\hat{\mathbf{a}}$, минимизирующий среднеквадратичную ошибку аппроксимации

$$\varepsilon^2=E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-g_0(\mathbf{x}))^2]. \tag{49}$$

Для минимизации ε^2 необходимо знать байесовскую разделяющую функцию $g_0(\mathbf{x})$. Однако, исходя из аналогичной ситуации, рассмотренной в п. 5.8.3, можно показать, что весовой вектор $\hat{\mathbf{a}}$, минимизирующий ε^2, также минимизирует функцию критерия, имеющую вид

$$J_m(\mathbf{a})=E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-z)^2]. \tag{50}$$

Данное заключение также должно следовать из того факта, что z, по существу, является зашумленным вариантом $g_0(\mathbf{x})$ (рис. 5.11). Поскольку

$$\nabla J_m = 2E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - z)\mathbf{y}],$$

то можно получить решение в замкнутой форме

$$\hat{\mathbf{a}} = E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t]^{-1} E[z\mathbf{y}]. \tag{51}$$

Таким образом, один из способов, основанный на использовании выборок, состоит в оценке $E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t]$ и $E[z\mathbf{y}]$ и применении выражения (51) с целью получения оптимальной линейной разделяющей функции. Другой метод заключается в минимизации $J_m(\mathbf{a})$ путем

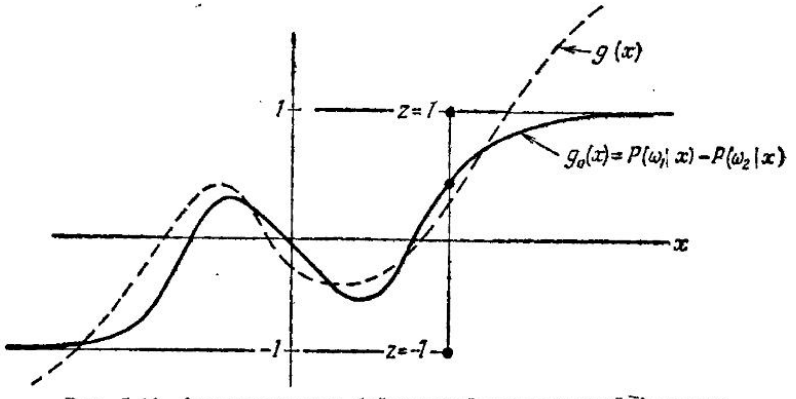


Рис. 5.11. Аппроксимация байесовской разделяющей функции.

применения процедуры градиентного спуска. Допустим, что вместо действительного градиента подставлено выражение для зашумленного варианта $2(\mathbf{a}^t\mathbf{y}_k - z_k)\mathbf{y}_k$. Это приведет к алгоритму спуска следующего вида:

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k (z_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}_k)\mathbf{y}_k, \tag{52}$$

который, по существу, представляет собой правило Видроу — Хоффа. Можно показать, что если матрица $E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t]$ не вырождена и коэффициенты ρ_k удовлетворяют условиям

$$\lim_{m\to\infty} \sum_{k=1}^{m} \rho_k = +\infty, \tag{53}$$

$$\lim_{m\to\infty} \sum_{k=1}^{m} \rho_k^2 < \infty, \tag{54}$$

то $\mathbf{a}_k$ сходится к $\hat{\mathbf{a}}$ в среднеквадратичном:

$$\lim_{k\to\infty} E[\|\mathbf{a}_k - \hat{\mathbf{a}}\|^2] = 0. \tag{55}$$

Причины наложения данных условий на ρ_k просты. Первое условие не позволяет весовому вектору сходиться настолько быстро, чтобы систематическая ошибка оставалась бы нескорректированной. Второе условие обеспечивает то обстоятельство, что случайные колебания в конечном счете гасятся. Оба условия удовлетворяются при соответствующем выборе $\rho_k = 1/k$. К сожалению, такой вид убывания ρ_k независимо от рассматриваемой задачи часто приводит к очень медленной сходимости.

Конечно, указанный алгоритм не единственный и не лучший алгоритм спуска для минимизации J_m. Например, если матрицу вторых частных производных для J_m задать следующим образом:

$$D = 2E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t],$$

то можно видеть, что алгоритм Ньютона для минимизации J_m [формула (11)] имеет вид

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t]^{-1} E[(z - \mathbf{a}^t\mathbf{y})\mathbf{y}].$$

Стохастическим аналогом данного алгоритма является

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + R_{k+1}(z_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}_k)\mathbf{y}_k \tag{56}$$

при

$$R_{k+1}^{-1} = R_k^{-1} + \mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^t, \tag{57}$$

или, что эквивалентно [1]),

$$R_{k+1} = R_k - \frac{R_k\mathbf{y}_k(R_k\mathbf{y}_k)^t}{1 + \mathbf{y}_k^t R_k \mathbf{y}_k}. \tag{58}$$

С помощью данного алгоритма также образуется последовательность весовых векторов, сходящихся к оптимальному решению в среднеквадратичном. В этом случае последовательность сходится быстрее, однако требуется выполнение большего количества вычислений за шаг.

Указанные градиентные процедуры могут рассматриваться как методы минимизации функции критерия, или определения нуля ее градиента, в присутствии помех. В литературе по статистике такие функции, как J_m и ∇J_m вида $E[f(\mathbf{a}, \mathbf{x})]$, называются *регрессионными функциями*, а итерационные алгоритмы называются *процедурами стохастической аппроксимации*. Наиболее известными из них является процедура Кифера — Вольфовица, применяемая для минимизации регрессионной функции, и процедура Роббинса — Монро, используемая для определения корня регрессионной функции. Зачастую легче всего доказать сходимость процедуры спуска или процедуры аппроксимации, показав, что она удовлетворяет

---

[1]) Данная рекуррентная формула для вычисления R_k, которое приблизительно равно $(1/k)E[\mathbf{y}\mathbf{y}^t]^{-1}$, не может быть использована, если матрица R_k вырождена. Эквивалентность соотношений (57) и (58) вытекает из задачи 10 гл. 3.

условиям сходимости более общих процедур. К сожалению, представление данных методов в полном объеме завело бы нас довольно далеко, и в заключение мы можем лишь посоветовать интересующимся читателям обратиться к литературе.

5.9. ПРОЦЕДУРЫ ХО — КАШЬЯПА

5.9.1. ПРОЦЕДУРА СПУСКА

Процедуры, рассмотренные до сих пор, различались в разных отношениях. При методе персептрона и процедуре релаксаций разделяющий вектор определялся в случае линейно разделяемых множеств, однако в случае неразделяемых множеств сходимости не наблюдалось. Процедуры нахождения решения по методу наименьших квадратов дают весовой вектор как в случае линейно разделяемых, так и в случае линейно неразделяемых выборок, однако нет гарантии, что указанный вектор будет разделяющим вектором в случае разделяемых множеств. Если вектор допуска $\mathbf{b}$ выбран произвольным образом, то можно сказать, что процедуры для решения по методу наименьших квадратов минимизируют выражение $||Y\mathbf{a}-\mathbf{b}||^2$. Тогда, если взятые выборки линейно разделяемы, существуют такие $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, что выполняется следующее условие:

$$Y\hat{\mathbf{a}}=\hat{\mathbf{b}}>0,$$

где $\hat{\mathbf{b}}>0$, что указывает на положительность каждой компоненты $\hat{\mathbf{b}}$. Очевидно, что при использовании равенства $\mathbf{b}=\hat{\mathbf{b}}$ и применении процедуры решения методом наименьших квадратов был бы получен разделяющий вектор. Конечно, обычно $\hat{\mathbf{b}}$ заранее неизвестно. Однако покажем теперь, как процедура решения по методу наименьших квадратов может быть модифицирована для получения как разделяющего вектора $\mathbf{a}$, так и вектора допуска $\mathbf{b}$. Проводимая идея вытекает из наблюдения, что если выборки разделимы и векторы как $\mathbf{a}$, так и $\mathbf{b}$, содержащиеся в функции критерия

$$J_s(\mathbf{a},\ \mathbf{b})=\|Y\mathbf{a}-\mathbf{b}\|^2,$$

могут изменяться (при условии, что $\mathbf{b}>0$), то минимальное значение J_s равно 0, а $\mathbf{a}$, которое достигается при данном минимуме, является разделяющим вектором.

Для минимизации J_s будем использовать модифицированную процедуру градиентного спуска. Градиент функции J_s, взятый относительно $\mathbf{a}$, записывается в виде

$$\nabla_{\mathbf{a}}J_s=2Y^t(Y\mathbf{a}-\mathbf{b}), \tag{59}$$

а градиент, взятый относительно $\mathbf{b}$, задается в виде

$$\nabla_{\mathbf{b}}J_s=-2(Y\mathbf{a}-\mathbf{b}). \tag{60}$$

При любой величине $\mathbf{b}$ можно всегда принять

$$\mathbf{a}=Y^{\dagger}\mathbf{b}, \tag{61}$$

получая тем самым $\nabla_{\mathbf{a}} J_s=0$ и минимизируя J_s по $\mathbf{a}$ за один шаг. Больших возможностей для изменения $\mathbf{b}$, однако, не имеется, поскольку нужно придерживаться условия $\mathbf{b}>0$, так что следует избегать процедуры спуска, которая приводит к $\mathbf{b}=0$. Один из способов, препятствующий сходимости $\mathbf{b}$ к 0, заключается в том, чтобы положить вначале $\mathbf{b}>0$ и впоследствии не уменьшать никакую из его компонент. Этого можно достичь при сохранении отрицательного градиента, если вначале все положительные компоненты $\nabla_{\mathbf{b}} J_s$ взять равными 0. Таким образом, если через $|\mathbf{v}|$ обозначить вектор, компоненты которого суть абсолютные величины компонент вектора $\mathbf{v}$, то придем к рассмотрению такой процедуры спуска:

$$\mathbf{b}_{k+1}=\mathbf{b}_k-\rho\frac{1}{2}[\nabla_{\mathbf{b}}J_s-|\nabla_{\mathbf{b}}J_s|].$$

Используя соотношения (60) и (61) и несколько более конкретизируя, получим *алгоритм Хо — Кашьяпа* минимизации функции $J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b})$:

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{b}_1>0, \text{ в остальном произвольный,}\\&\mathbf{b}_{k+1}=\mathbf{b}_k+2\rho\mathbf{e}_k^{+},\end{aligned}\right\} \tag{62}$$

где $\mathbf{e}_k$ является вектором ошибки:

$$\mathbf{e}_k=Y\mathbf{a}_k-\mathbf{b}_k, \tag{63}$$

а $\mathbf{e}_k^{+}$ — положительная составляющая вектора ошибки:

$$\mathbf{e}_k^{+}=\frac{1}{2}(\mathbf{e}_k+|\mathbf{e}_k|), \tag{64}$$

и

$$\mathbf{a}_k=Y^{\dagger}\mathbf{b}_k, \quad k=1, 2, \ldots. \tag{65}$$

Поскольку весовой вектор $\mathbf{a}_k$ полностью определяется вектором допуска $\mathbf{b}_k$, то это, по существу, и есть алгоритм для образования последовательности векторов допуска. Вектор $\mathbf{b}_1$, с которого начинается последовательность, положителен, и если $\rho>0$, то все последующие векторы $\mathbf{b}_k$ будут положительны. Мы можем опасаться, что если ни одна из компонент вектора $\mathbf{e}_k$ не положительна, так что изменение $\mathbf{b}_k$ прекращается, то мы не получим решения. Однако, как мы увидим, в этом случае либо $\mathbf{e}_k=0$ и решение получено, либо $\mathbf{e}_k\leqslant 0$ и можно доказать, что выборки линейно не разделяемы.

5.9.2. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СХОДИМОСТИ

Покажем теперь, что если выборки линейно разделяемы и $0<\rho<1$, то процедура Хо — Кашьяпа будет давать вектор решения за конечное число шагов. Чтобы сделать алгоритм конечным, следовало бы добавить правило остановки, по которому процесс коррекций прекратится сразу же, как будет найден вектор решения. Однако более удобно считать процесс коррекций непрерывным и показать, что вектор ошибки $\mathbf{e}_k$ либо становится нулевым при некотором конечном k, либо сходится к нулевому при $k\to\infty$.

Очевидно, что либо $\mathbf{e}_k=0$ при некотором k, скажем при k_0, либо в последовательности $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots$ не содержится нулевых векторов. В первом случае, как только нулевой вектор получен, ни один из векторов $\mathbf{a}_k$, $\mathbf{b}_k$ или $\mathbf{e}_k$ больше не изменяется и $Y\mathbf{a}_k=\mathbf{b}_k>0$ для всех $k\geqslant k_0$. Таким образом, при получении нулевого вектора ошибки алгоритм автоматически останавливается, и мы имеем вектор решения.

Предположим теперь, что $\mathbf{e}_k$ никогда не станет нулевым при конечном k. Чтобы показать, что $\mathbf{e}_k$ тем не менее должно сходиться к нулю, сначала поставим вопрос, возможно ли получение $\mathbf{e}_k$ с неположительными компонентами. Указанное обстоятельство должно быть наиболее нежелательным, поскольку требуется, чтобы выполнялось условие $Y\mathbf{a}_k\leqslant\mathbf{b}_k$, и поскольку $\mathbf{e}_k^+$ должно быть нулевым, чтобы прекратилось дальнейшее изменение $\mathbf{a}_k$, $\mathbf{b}_k$ или $\mathbf{e}_k$. К счастью, данная ситуация может никогда не возникнуть, если выборки линейно разделяемы. Доказательство просто и основано на том факте, что если $Y^tY\mathbf{a}_k=Y^t\mathbf{b}_k$, то $Y^t\mathbf{e}_k=0$. Однако в случае линейно разделяемых выборок существуют такие $\hat{\mathbf{a}}$ и $\hat{\mathbf{b}}>0$, что справедливо соотношение

$$Y\hat{\mathbf{a}}=\hat{\mathbf{b}}.$$

Таким образом,

$$\mathbf{e}_k^tY\hat{\mathbf{a}}=0=\mathbf{e}_k^t\hat{\mathbf{b}},$$

и поскольку все компоненты вектора $\hat{\mathbf{b}}$ положительны, то либо $\mathbf{e}_k=0$, либо по крайней мере одна из компонент $\mathbf{e}_k$ должна быть положительна. Поскольку случай $\mathbf{e}_k=0$ исключен, из этого следует, что $\mathbf{e}_k^+$ может не быть нулем при конечном k.

Для доказательства того, что вектор ошибки всегда сходится к нулю, используется тот факт, что матрица YY^+ симметрична, положительно полуопределена и удовлетворяет соотношению

$$(YY^+)^t(YY^+)=YY^+. \tag{66}$$

Хотя эти результаты справедливы и в общем случае, для простоты рассмотрим их только для невырожденной матрицы Y^tY. В этом случае $YY^+=Y(Y^tY)^{-1}Y^t$, и симметричность очевидна. Поскольку матрица Y^tY является положительно определенной, то сущест-

вует матрица $(Y^tY)^{-1}$; таким образом, $\mathbf{b}^tY\,(Y^tY)^{-1}\,Y^t\mathbf{b}\geqslant 0$ при любом $\mathbf{b}$, и матрица $YY^\dagger$ является по крайней мере положительно полуопределенной. Итак, соотношение (66) вытекает из следующего:

$$(YY^\dagger)^t\,(YY^\dagger)=[Y\,(Y^tY)^{-1}Y^t]\,[Y\,(Y^tY)^{-1}Y^t].$$

Чтобы показать, что $\mathbf{e}_k$ должно сходиться к нулю, исключим $\mathbf{a}_k$ из (63)—(65) и получим следующее выражение:

$$\mathbf{e}_k=(YY^\dagger-I)\,\mathbf{b}_k.$$

Затем, используя (62), получим рекуррентную формулу

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_{k+1}&=(YY^\dagger-I)\,(\mathbf{b}_k+2\rho\mathbf{e}_k^+)=\\&=\mathbf{e}_k+2\rho\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+,\end{aligned}\tag{67}$$

так что

$$\frac{1}{4}\|\mathbf{e}_{k+1}\|^2=\frac{1}{4}\|\mathbf{e}_k\|^2+\rho\mathbf{e}_k^t\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+\|\rho\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+\|^2.$$

Как второй, так и третий члены значительно упрощаются. Поскольку $\mathbf{e}_k^tY=0$, второй член представляется в виде

$$\rho\mathbf{e}_k^t\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+=-\rho\mathbf{e}_k^t\mathbf{e}_k^+=-\rho\,\|\mathbf{e}_k^+\|^2;$$

ненулевые компоненты вектора $\mathbf{e}_k^+$ являются положительными компонентами вектора $\mathbf{e}_k$. Поскольку матрица $YY^\dagger$ симметрична и равна произведению $(YY^\dagger)^t\,(YY^\dagger)$, третий член упростится до следующего выражения:

$$\begin{aligned}\|\rho\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+\|^2&=\rho^2\mathbf{e}_k^{+t}\,(YY^\dagger-I)^t\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+=\\&=\rho^2\,\|\mathbf{e}_k^+\|^2-\rho^2\mathbf{e}_k^{+t}YY^\dagger\mathbf{e}_k^+.\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\frac{1}{4}(\|\mathbf{e}_k\|^2-\|\mathbf{e}_{k+1}\|^2)=\rho\,(1-\rho)\,\|\mathbf{e}_k^+\|^2+\rho^2\mathbf{e}_k^{+t}YY^\dagger\,\mathbf{e}_k^+.\tag{68}$$

Поскольку предполагается, что вектор $\mathbf{e}_k^+$ ненулевой и матрица $YY^\dagger$ является положительной полуопределенной, то $\|\mathbf{e}_k\|^2>\|\mathbf{e}_{k+1}\|^2$, если $0<\rho<1$. Таким образом, последовательность $\|\mathbf{e}_1\|^2$, $\|\mathbf{e}_2\|^2$, ... будет монотонно убывающей и должна сходиться к некоторому предельному значению $\|\mathbf{e}\|^2$. Однако в случае рассматриваемой сходимости $\mathbf{e}_k^+$ должно сходиться к нулю, так что все положительные компоненты $\mathbf{e}_k$ должны сходиться к нулю. И поскольку $\mathbf{e}_k^t\hat{\mathbf{b}}=0$ для всех k, отсюда следует, что все компоненты вектора $\mathbf{e}_k$ должны сходиться к нулю. Таким образом, при условии, что $0<\rho<1$ и выборки линейно разделяемы, $\mathbf{a}_k$ будет сходиться к вектору решения при k, стремящемся к бесконечности.

Если на каждом шаге проверяются знаки компонент вектора $Y\mathbf{a}_k$ и алгоритм останавливается при условии, что они положительны,

то фактически получаем разделяющий вектор в случае конечного числа шагов. Это следует из того факта, что $Y\mathbf{a}_k=\mathbf{b}_k+\mathbf{e}_k$ и что компоненты вектора $\mathbf{b}_k$ никогда не убывают. Таким образом, если $b_{\min}$ является наименьшей компонентой вектора $\mathbf{b}_1$ и если $\mathbf{e}_k$ сходится к нулю, то вектор $\mathbf{e}_k$ должен попасть в гиперсферу $\|\mathbf{e}_k\|=b_{\min}$ после конечного числа шагов, при котором $Y\mathbf{a}_k>0$. Хотя в целях упрощения доказательства условия остановки были исключены, указанное условие должно всегда применяться на практике.

5.9.3. ПОВЕДЕНИЕ В СЛУЧАЕ НЕРАЗДЕЛЯЕМЫХ МНОЖЕСТВ

Если только что приведенное доказательство сходимости рассмотреть с целью выяснения использования предположения о разделяемости, то окажется, что данное предположение было использовано дважды. Во-первых, было использовано соотношение $\mathbf{e}_k^t\hat{\mathbf{b}}=0$, чтобы показать, что либо $\mathbf{e}_k=0$ при некотором конечном k, либо $\mathbf{e}_k^+$ никогда не станет нулевым и коррекции не прекратятся. Во-вторых, такое же условие было использовано с целью показать, что если $\mathbf{e}_k^+$ сходится к нулю, то $\mathbf{e}_k$ тоже должно сходиться к нулю.

Если выборки линейно не разделяемы, то из этого больше не следует, что при $\mathbf{e}_k^+$, равном нулю, $\mathbf{e}_k$ тоже должно быть равным нулю. Действительно, для задачи с неразделяемым множеством вполне можно получить ненулевой вектор ошибки с положительными компонентами. Если это происходит, алгоритм автоматически останавливается и обнаруживается, что выборки неразделяемы.

Что получается, если образы неразделяемы, а $\mathbf{e}_k^+$ никогда не обращается в нуль? В данном случае все же выполняются

$$\mathbf{e}_{k+1}=\mathbf{e}_k+2\rho\,(YY^\dagger-I)\,\mathbf{e}_k^+, \tag{67}$$

$$\frac{1}{4}(\|\mathbf{e}_k\|^2-\|\mathbf{e}_{k+1}\|^2)=\rho\,(1-\rho)\,\|\mathbf{e}_k^+\|^2+\rho^2\mathbf{e}_k^{+t}YY^\dagger\mathbf{e}_k^+. \tag{68}$$

Таким образом, последовательность $\|\mathbf{e}_1\|^2$, $\|\mathbf{e}_2\|^2$, ... все еще сходится, хотя предельное значение $\|\mathbf{e}\|^2$ может не быть равным нулю. Поскольку условие сходимости требует, чтобы вектор $\mathbf{e}_k^+$ сходился к нулю, можно сделать заключение, что либо $\mathbf{e}_k^+=0$ при некотором конечном k, либо $\mathbf{e}_k^+$ сходится к нулю, тогда как значение $\|\mathbf{e}_k\|$ отличается от нулевого. Таким образом, алгоритм Хо — Кашьяпа дает разделяющий вектор для случая разделяемых множеств и явно обнаруживает неразделяемость для случая неразделяемых множеств. Однако не существует ограничения числа шагов, необходимых для обнаружения неразделяемости.

5.9.4. НЕКОТОРЫЕ СВЯЗАННЫЕ ПРОЦЕДУРЫ

Если записать равенство $Y^\dagger = (Y^tY)^{-1}Y^t$ и использовать соотношение $Y^t\mathbf{e}_k=0$, то алгоритм Хо — Кашьяпа можно представить в виде

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{b}_1 > 0, \text{ в остальном произвольно,}\\ &\mathbf{a}_1 = Y^\dagger\mathbf{b}_1,\\ &\mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{b}_k + \rho(\mathbf{e}_k + |\mathbf{e}_k|),\\ &\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho Y^\dagger|\mathbf{e}_k|, \end{aligned}\right\} \tag{69}$$

где, как обычно,

$$\mathbf{e}_k = Y\mathbf{a}_k - \mathbf{b}_k. \tag{70}$$

Данный алгоритм отличается от алгоритмов персептрона и релаксаций для решения линейных неравенств по крайней мере тремя свойствами: 1) он изменяет как весовой вектор **a**, так и вектор допуска **b**, 2) он явно обнаруживает наличие неразделяемости, однако 3) требует псевдообращения Y. Даже при однократном проведении указанного вычисления необходимо затратить некоторое время и применить специальную обработку, если матрица Y^tY вырождена. Другой алгоритм, представляющий интерес, имеет сходство с (69), но исключает необходимость вычисления $Y^\dagger$. Он записывается следующим образом:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{b}_1 > 0, \quad \text{в остальном произвольно,}\\ &\mathbf{a}_1 \quad\quad \text{произвольно,}\\ &\mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{b}_k + (\mathbf{e}_k + |\mathbf{e}_k|),\\ &\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho RY^t|\mathbf{e}_k|, \end{aligned}\right\} \tag{71}$$

где R является произвольно выбранной постоянной положительно определенной матрицей размера $\hat{d}\times\hat{d}$. Покажем, что при правильном выборе ρ данный алгоритм также будет давать вектор решения за конечное число шагов, при условии что решение существует. Более того, если решение не существует, вектор $Y^t|\mathbf{e}_k|$ либо обращается в нуль, указывая на неразделяемость, либо сходится к нулю.

Доказательство проводится весьма непосредственно. В случае, когда выборки либо линейно разделяемы, либо линейно неразделяемы, соотношения (70) и (71) показывают, что

$$\mathbf{e}_{k+1} = Y\mathbf{a}_{k+1} - \mathbf{b}_{k+1} = (\rho YRY^t - I)|\mathbf{e}_k|.$$

Таким образом,

$$\|\mathbf{e}_{k+1}\|^2 = |\mathbf{e}_k|^t(\rho^2 YRY^tYRY - 2\rho YRY^t + I)|\mathbf{e}_k|$$

и

$$\|\mathbf{e}_k\|^2 - \|\mathbf{e}_{k+1}\|^2 = (Y^t|\mathbf{e}_k|)^t A\,(Y^t|\mathbf{e}_k|), \tag{72}$$

где

$$A = 2\rho R - \rho^2 RY^tR. \tag{73}$$

Очевидно, что если ρ положительно, но достаточно мало, матрица A будет приблизительно равна $2\rho R$ и, следовательно, будет положительно определенной. Таким образом, если $Y^t|\mathbf{e}_k| \neq 0$, получим $\|\mathbf{e}_k\|^2 > \|\mathbf{e}_{k+1}\|^2$.

Здесь следует провести различие между случаями разделяемых и неразделяемых множеств. При налични разделяемого множества существуют векторы $\hat{\mathbf{a}}$ и $\hat{\mathbf{b}} > 0$, удовлетворяющие выражению $Y\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{b}}$. Таким образом, если $|\mathbf{e}_k| \neq 0$, то справедливо соотношение

$$|\mathbf{e}_k|^t Y\hat{\mathbf{a}} = |\mathbf{e}_k|^t \hat{\mathbf{b}} > 0,$$

так что вектор $Y^t|\mathbf{e}_k|$ не может быть нулевым, если $\mathbf{e}_k$ не равно нулю. Таким образом, последовательность $\|\mathbf{e}_1\|^2$, $\|\mathbf{e}_2\|^2$, ... является монотонно убывающей и должна сходиться к некоторому предельному значению $\|\mathbf{e}\|^2$. Одиако в условиях рассматриваемой сходимости вектор $Y^t|\mathbf{e}_k|$ должен сходиться [1]) к нулю, откуда вытекает, что $|\mathbf{e}_k|$ и, следовательно, $\mathbf{e}_k$ также должен сходиться к нулю. Поскольку $\mathbf{e}_k$ начинается с положительного значения и никогда не убывает, отсюда следует, что $\mathbf{a}_k$ должен сходиться к разделяющему вектору. Более того, при использовании вышеприведенного утверждения решение фактически получается после конечного числа шагов.

В случае неразделяемых множеств вектор $\mathbf{e}_k$ может либо быть ненулевым, либо не сходиться к нулю. Может оказаться, что на некотором шаге будет $Y^t|\mathbf{e}_k| = 0$; это доказывает наличие неразделяемости множеств. Однако возможна и другая ситуация, при которой коррекции никогда не прекращаются. В данном случае из этого опять следует, что последовательность $\|\mathbf{e}_1\|^2$, $\|\mathbf{e}_2\|^2$, ... должна сходиться к предельному значению $\|\mathbf{e}\|^2 \neq 0$ и что вектор $Y^t\|\mathbf{e}_k\|$ должен сходиться к нулю. Таким образом, опять получаем очевидность неразделяемости в случае неразделяемых множеств.

Заканчивая разбор данной темы, коротко рассмотрим вопрос выбора ρ и R. Простейшим вариантом выбора R является единичная матрица, в случае которой $A = 2\rho I - \rho^2 Y^t Y$. Данная матрица будет положительно определенной, что гарантирует условие сходимости, если $0 < \rho < 2/\lambda_{max}$, где λ_{max} является наибольшим собственным значением матрицы Y^tY. Поскольку след матрицы Y^tY представляется как суммой собственных значений матрицы Y^tY, так и суммой квадратов элементов матрицы Y, то при выборе величины ρ может быть использована пессимистическая граница, а именно $\hat{d}\lambda_{max} \leqslant \leqslant \Sigma\|\mathbf{y}_i\|^2$.

Более интересный подход состоит в выборе такого значения ρ на каждом шаге, которое минимизирует выражение $\|\mathbf{e}_k\|^2 - \|\mathbf{e}_{k+1}\|^2$.

---

[1]) Возможно, конечно, что на некотором шаге получим $\mathbf{e}_k = 0$, и тогда сходимость будет наблюдаться в данной точке.

Из соотношений (72) и (73) получаем

$$\|\mathbf{e}_k\|^2 - \|\mathbf{e}_{k+1}\|^2 = |\mathbf{e}_k|^t Y (2\rho R - \rho^2 R Y^t Y R) Y^t |\mathbf{e}_k|. \qquad (74)$$

Дифференцируя по ρ, получаем оптимальную величину ρ_k, выражаемую отношением

$$\rho_k = \frac{|\mathbf{e}_k|^t Y R Y^t |\mathbf{e}_k|}{|\mathbf{e}_k|^t Y R Y^t Y R Y^t |\mathbf{e}_k|}, \qquad (75)$$

которое при $R=I$ упрощается до выражения

$$\rho_k = \frac{\|Y^t |\mathbf{e}_k|\|^2}{\|Y Y^t |\mathbf{e}_k|\|^2}. \qquad (76)$$

Такой же подход можно применить для выбора матрицы R. Заменяя R в соотношении (74) симметричной матрицей $R+\delta R$ и отбрасывая члены второго порядка, получаем выражение

$$\delta(\|\mathbf{e}_k\|^2 - \|\mathbf{e}_{k+1}\|^2) = |\mathbf{e}_k| Y [\delta R^t (I - \rho Y^t Y R) + (I - \rho R Y^t Y)\, \delta R] Y^t |\mathbf{e}_k|.$$

Таким образом, уменьшение вектора квадратичной ошибки максимизируется при выборе

$$R = \frac{1}{\rho} (Y^t Y)^{-1}, \qquad (77)$$

и, поскольку $\rho R Y^t = Y^\dagger$, алгоритм спуска становится, по существу, аналогичным первоначальному алгоритму Хо — Кашьяпа.

5.10. ПРОЦЕДУРЫ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

5.10.1. ЛИНЕЙНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ

Методы персептрона, релаксаций и Хо — Кашьяпа являются по существу методами градиентного спуска, приспособленными для решения систем линейных неравенств. Техника линейного программирования сводится к процедурам максимизации или минимизации линейных функций, удовлетворяющих линейному уравнению и наложенным на них ограничениям в виде линейных неравенств (заметим, что решение этих неравенств является частью общего решения задачи линейного программирования). В этом разделе будут рассмотрены два возможных подхода к решению таких задач. Для усвоения излагаемого материала от читателя не потребуется никаких предварительных знаний из области линейного программирования, хотя они могли бы оказаться полезными при решении практических задач.

Классическая задача линейного программирования формулируется следующим образом: найти вектор $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \ldots, u_m)^t$,

который минимизирует линейную *целевую функцию*

$$z = \boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{u} \tag{78}$$

и удовлетворяет ограничению

$$A\mathbf{u} \geqslant \boldsymbol{\beta}, \tag{79}$$

где $\boldsymbol{\alpha}$ есть $(m \times 1)$-*вектор цен*, $\boldsymbol{\beta}$ — $l \times 1$-вектор и A — $l \times m$-матрица.

Для решения поставленной задачи может быть использован *симплекс-метод*; его описание можно найти в любой книге по линейному программированию. Симплекс-метод представляет собой классическую итеративную процедуру. Его использование требует введения еще одного ограничения для вектора $\mathbf{u}$, а именно

$$\mathbf{u} \geqslant 0. \tag{80}$$

Если искать $\mathbf{u}$ в виде некоторого весового вектора $\mathbf{a}$, то такое ограничение неприемлемо, так как в большинстве случаев вектор решения будет иметь как положительные, так и отрицательные компоненты. Однако если представить $\mathbf{a}$ в виде

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^-, \tag{81}$$

где

$$\mathbf{a}^+ = \frac{1}{2}(|\mathbf{a}| + \mathbf{a}) \tag{82}$$

и

$$\mathbf{a}^- = \frac{1}{2}(|\mathbf{a}| - \mathbf{a}), \tag{83}$$

то и $\mathbf{a}^+$, и $\mathbf{a}^-$ будут неотрицательны. Отождествляя компоненты $\mathbf{u}$, например, с компонентами $\mathbf{a}^+$ и $\mathbf{a}^-$, мы можем наложить ограничение $\mathbf{u} \geqslant 0$.

5.10.2. СЛУЧАЙ ЛИНЕЙНО РАЗДЕЛЯЕМЫХ МНОЖЕСТВ

Пусть имеется множество из n выборок $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$ и требуется найти весовой вектор $\mathbf{a}$, удовлетворяющий неревенству $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i \geqslant b_i > 0$ при всех i. Как сформулировать эту задачу в терминах линейного программирования? Один из способов состоит в введении так называемой *искусственной переменной* t с помощью выражений

$$\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i + t \geqslant b_i$$

и

$$t \geqslant 0.$$

Если t достаточно велико, эти условия выполняются без труда, например если $\mathbf{a}=0$ и $t = \max_i b_i$ [1]). Однако такой случай не представляет

[1]) В терминах линейного программирования любое решение, удовлетворяющее налагаемым ограничениям, называется *допустимым решением*. Допустимое решение, для которого число ненулевых переменных не превосходит числа ог-

интереса с точки зрения решения поставленной задачи. Нас интересует как раз случай, когда $t=0$, т. е. тот случай, когда t принимает минимальное значение, при котором еще выполняется условие $t\geqslant 0$. Таким образом, мы приходим к следующей задаче: найти минимальное значение t среди всех t и $\mathbf{a}$, удовлетворяющих условиям $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i+t\geqslant b_t$ и $t\geqslant 0$. Если в результате t окажется равным нулю, то выборки линейно разделяемы и полученный весовой вектор и будет искомым. Если же t окажется положительным, то разделяющего вектора не существует и, следовательно, выборки линейно неразделяемы.

Формально наша задача состоит в том, чтобы найти вектор $\mathbf{u}$, минимизирующий целевую функцию $z=\alpha^t\mathbf{u}$ и удовлетворяющий ограничениям $A\mathbf{u}\geqslant\beta$ и $\mathbf{u}\geqslant 0$, где

$$A=\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1^t & -\mathbf{y}_1^t & 1 \\ \mathbf{y}_2^t & -\mathbf{y}_2^t & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{y}_n^t & -\mathbf{y}_n^t & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}=\begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \\ t \end{bmatrix}, \quad \alpha=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \beta=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Таким образом, задача линейного программирования содержит $m=2\hat{d}+1$ переменных и $l=n$ ограничений плюс ограничения симплекс-метода $\mathbf{u}\geqslant 0$. Симплекс-метод позволяет за конечное число шагов найти минимальное значение целевой функции $z=\alpha^t\mathbf{u}=t$; одновременно с этим определяется и вектор $\hat{\mathbf{u}}$, доставляющий z это значение. Если выборки линейно разделяемы, то минимальное значение t равно нулю, и вектор решения $\hat{\mathbf{a}}$ может быть получен из $\hat{\mathbf{u}}$. Если же выборки неразделяемы, то минимальное значение t будет положительным числом. Полученное значение вектора $\hat{\mathbf{u}}$ обычно не пригодно в качестве приближенного решения, но по крайней мере позволяет получить доказательство неразделяемости взятых выборок.

5.10.3. МИНИМИЗАЦИЯ ПЕРСЕПТРОННОЙ ФУНКЦИИ КРИТЕРИЯ

В большинстве прикладных задач классификации образов нельзя a priori предполагать, что выборки линейно разделяемы. Это относится, например, к случаю, когда образы неразделяемы, и все же требуется найти весовой вектор, с помощью которого можно было бы правильно классифицировать как можно большее число выборок. К сожалению, количество ошибок не является линейной функцией компонент весового вектора, а ее минимизация не явля-

ранений (не считая специального требования симплекс-метода о неотрицательности переменных), называется *базисным допустимым решением*. Таким образом, решение $\mathbf{a}=0$ и $t=\max_i b_i$ является базисным допустимым решением. Наличие такого решения упрощает применение симплекс-метода.

ется задачей линейного программирования. Однако оказывается, что задачу минимизации персептронной функции критерия можно сформулировать как задачу линейного программирования. Поскольку минимизация такой функции критерия дает разделяющий вектор в случае разделяемых множеств и приводит к разумному решению в случае, когда выборки неразделяемы, такой подход является чрезвычайно привлекательным.

Базисная персептронная функция критерия задается следующим выражением:

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} (-\mathbf{a}^t \mathbf{y}), \tag{12}$$

где $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ — множество выборок, классифицируемых с ошибкой посредством вектора $\mathbf{a}$. Для того чтобы исключить тривиальное решение $\mathbf{a}=0$, введем положительный вектор допуска $\mathbf{b}$ и напишем выражение

$$J_p'(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}_i \in \mathcal{Y}'} (b_i - \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i), \tag{84}$$

где $\mathbf{y}_i \in \mathcal{Y}'$, если $\mathbf{a}^t \mathbf{y}_i \leqslant b_i$. Очевидно, что J_p' является не линейной, а кусочно линейной функцией от $\mathbf{a}$, и поэтому непосредственное применение метода линейного программирования здесь невозможно. Однако если ввести n искусственных переменных и соответствующих им ограничений, то можно построить некоторую эквивалентную линейную целевую функцию. Рассмотрим задачу отыскания векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{t}$, минимизирующих линейную функцию

$$z = \sum_{i=1}^{n} t_i$$

при ограничениях

$$t_i \geqslant 0$$

и

$$t_i \geqslant b_i - \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i.$$

Очевидно, что для любого фиксированного значения вектора $\mathbf{a}$ минимальное значение z в точности равно $J_p'(\mathbf{a})$, поскольку при имеющихся ограничениях мы получим наилучший результат, если положим $t_i = \max(0, b_i - \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i)$. Если теперь найти минимум z по всем возможным значениям $\mathbf{t}$ и $\mathbf{a}$, то мы получим минимально возможное значение $J_p'(\mathbf{a})$. Таким образом, задачу минимизации $J_p'(\mathbf{a})$ мы свели к задаче минимизации линейной функции z при наличии ограничений в виде линейных неравенств. Приняв $\mathbf{u}_n$ за n-мерный единичный вектор, приходим к следующей задаче с $m = 2\hat{d} + n$ переменными и $l = n$ ограничениями: минимизировать $\boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{u}$ при условии

$A\mathbf{u} \geqslant \boldsymbol{\beta}$ и $\mathbf{u} \geqslant 0$, где

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1^t & -\mathbf{y}_1^t & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{y}_2^t & -\mathbf{y}_2^t & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{y}_n^t & -\mathbf{y}_n^t & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \\ \mathbf{t} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{u}_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Выбор $\mathbf{a}=\mathbf{0}$ и $t_i=b_i$ обеспечивает базисное допустимое решение, которое позволяет теперь применить алгоритм симплекс-метода. В результате за конечное число шагов может быть определено то значение $\hat{\mathbf{a}}$, которое доставляет минимум $J_p'(\mathbf{a})$.

5.10.4. ЗАМЕЧАНИЯ

Мы описали два способа постановки задачи отыскания линейной разделяющей функции как задачи линейного программирования. Существуют и другие способы, среди которых особый интерес с вычислительной точки зрения представляют те методы, которые сформулированы на основе *двойственной задачи*. Вообще говоря, методы типа симплекс-метода есть не что иное, как несколько усложненные методы градиентного спуска, предназначенные для отыскания экстремумов линейных функций при наличии ограничений в виде линейных неравенств. Подготовка алгоритма линейного программирования для решения на ЭВМ обычно представляет собой более сложную задачу по сравнению с такой же операцией, примененной для более простых процедур спуска, которые мы описывали ранее.

Однако блоки общего назначения, составленные для задачи линейного программирования, часто могут быть использованы либо без всяких изменений, либо с очень незначительными изменениями в других задачах. При этом сходимость процесса гарантирована как в случае линейной разделяемости, так и в случае, когда исходные выборки неразделяемы.

Различные алгоритмы для отыскания линейных разделяющих функций, описанные в данной главе, сведены в табл. 5.1. Естественно спросить, какой же из этих алгоритмов является наилучшим. Однозначного ответа на этот вопрос дать нельзя. Выбор подходящего алгоритма определяется такими фактами, как необходимые характеристики, простота программирования, количество и размерность выборок. Если линейная разделяющая функция обеспечивает незначительный процент ошибок, любая из этих процедур при корректном ее применении позволит получить хорошее качество решения.

Таблица 5.1

Процедуры спуска для отыскания линейных разделяющих функций

Процедура	Функция критерия	Алгоритм спуска	Условия	Примечания
с постоянным приращением	$J_p = \sum_{\mathbf{a}^t\mathbf{y} \leqslant 0} (-\mathbf{a}^t\mathbf{y})$	$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \mathbf{y}^k \quad (\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant 0)$	—	В случае линейной разделяемости сходится за конечное число шагов к решению с $\mathbf{a}^t\mathbf{y} > 0$; $\mathbf{a}_k$ всегда ограниченно
с переменным приращением	$J_p' = \sum_{\mathbf{a}^t\mathbf{y} \leqslant b} -(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - b)$	$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k \mathbf{y}^k \quad (\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant b)$	$\rho_k \geqslant 0, \quad \sum \rho_k \to \infty, \quad \frac{\sum \rho_k^2}{(\sum \rho_k)^2} \to 0$	В случае линейной разделяемости сходится к решению с $\mathbf{a}^t\mathbf{y} > b$. Сходится за конечное число шагов, если $0 < \alpha \leqslant \rho_k \leqslant \beta < \infty$
релаксаций	$J_r = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{a}^t\mathbf{y} \leqslant b} \frac{(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - b)^2}{\|\mathbf{y}\|^2}$	$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho \frac{b - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|^2} \mathbf{y}^k$ $(\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k \leqslant b)$	$0 < \rho < 2$	В случае линейной разделяемости сходится к решению с $\mathbf{a}^t\mathbf{y} \geqslant b$. Если $b > 0$, сходится за конечное число шагов к решению с $\mathbf{a}^t\mathbf{y} > 0$
Видроу — Хоффа	$\frac{1}{2} J_s = \frac{1}{2} \sum (\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i - b_i)^2$	$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k (b_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}^k)\mathbf{y}^k$	$\rho_k > 0, \quad \rho_k \to 0$	Стремится к решению, минимизирующему J_s
стохастической аппроксимации	$J_m = E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - z)^2]$	$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k (z_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}_k)\mathbf{y}^k$	$\sum \rho_k \to \infty, \quad \sum \rho_k^2 \to L < \infty$	Содержит бесконечное число выборок, полученных случайным перебором; в смысле среднеквадратичного сходится к решению, минимизирующему J_m; кроме того, обеспечивает наилучшее в смысле минимума квадратичной ошибки приближение для байесовской разделяющей функции
		$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + R_k (z_k - \mathbf{a}_k^t\mathbf{y}_k)\mathbf{y}_k$	$R_{k+1}^{-1} = R_k^{-1} + \mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^t$	

псевдообращения	$J_s = \| Ya - b \|^2$	$a = Y^+ b$	—	Как [illegible] решение методом наименьших квадратов; специальный выбор b дает линейный дискриминант Фишера и наилучшее в смысле минимума квадратичной ошибки приближение для байесовской разделяющей функции
Хо—Кашьяпа	$J_s = \| Ya - b \|^2$	$b_{k+1} = b_k + \rho (e_k + \| e_k \|)$ $e_k = Y a_k - b_k$ $a_k = Y^+ b_k$	$0 < \rho < 1$, $b_1 > 0$	a_k есть решение по методу наименьших квадратов для каждого b_k; в случае линейной разделяемости сходится за конечное число шагов; если $e_k \leqslant 0$, но $e_k \neq 0$, выборки неразделяемы
		$b_{k+1} = b_k + (e_k + \| e_k \|)$ $a_{k+1} = a_k + \rho_k R Y^t \| e_k \|$	$\rho_k = \dfrac{\| e_k \|^t Y R Y^t \| e_k \|}{\| e_k \|^t Y R Y^t Y R Y^t \| e_k \|}$ оптимален; R симметрична, положительно определена; $b_1 > 0$	В случае линейной разделяемости сходится за конечное число шагов; если $Y^t \| e_k \| = 0$, но $e_k \neq 0$, выборки неразделяемы
линейного программирования	$t = \max\limits_{a^t y_i \leqslant b_i} [-(a^t y_i - b_i)]$	Симплекс-метод	$a^t y_i + t \geqslant b_i, \quad t \geqslant 0$	И в разделяемом, и в неразделяемом случаях сходится за конечное число шагов; полезным является решение только в случае разделяемости
	$J_p' = \sum\limits_{i=1}^{n} t_i = \sum\limits_{a^t y_i \leqslant b_i} -(a^t y_i - b_i)$	Симплекс-метод	$a^t y_i + t_i \geqslant b_i, \quad t_i \geqslant 0$	Как в разделяемом, так и в неразделяемом случае сходится за конечное число шагов к решению, минимизирующему персептронную функцию критерия

5.11. МЕТОД ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Рассмотрение способов определения линейных разделяющих функций будет неполным, если мы не упомянем о методе потенциальных функций. Данный подход тесно связан с некоторыми уже рассмотренными нами методами, такими, как оценки парзеновского окна, метод персептрона и метод стохастической аппроксимации. Толчком к созданию метода потенциальных функций послужило следующее обстоятельство; если выборки $\mathbf{x}_i$ представлять себе как точки некоторого пространства и в эти точки поместить заряды соответственно $+q_i$, если $\mathbf{x}_i$ помечено символом ω_1, и $-q_i$, если $\mathbf{x}_i$

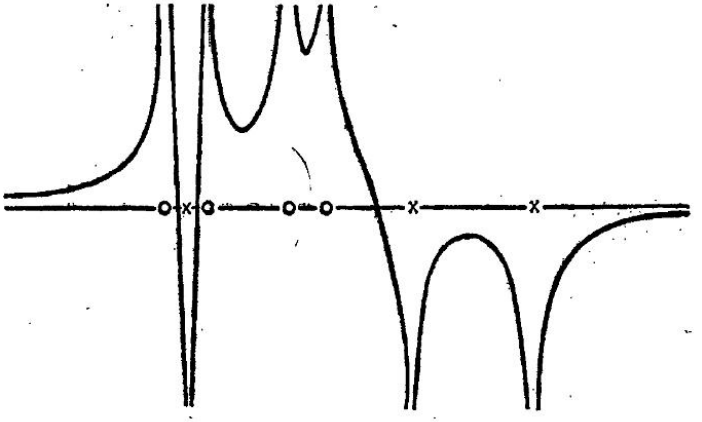


Рис. 5.12. Поле распределения потенциала как разделяющая фуикция.
○ — выборки класса 1, × — выборки класса 2.

помечено символом ω_2, то, возможно, функцию, описывающую распределение электростатического потенциала в таком поле, можно будет использовать в качестве разделяющей функции (рис. 5.12). Если потенциал точки $\mathbf{x}$, создаваемый единичным зарядом, находящимся в точке $\mathbf{x}_i$, равен $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$, то потенциал, создаваемый n зарядами в точке $\mathbf{x}$, определяется выражением

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} q_i K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i). \tag{85}$$

Потенциальная функция $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$, используемая в классической физике, обратно пропорциональна величине $\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i\|$. Имеется и много других функций, которые с таким же успехом могут быть использованы для наших целей. Существует очевидная аналогия между функцией $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ и функцией парзеновского окна $\varphi[(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)/h]$; по своему виду разделяющая функция $g(\mathbf{x})$ очень похожа на разность оценок парзеновского окна для случая двух

плотностей. Но поскольку нашей задачей является лишь построение нужной разделяющей функции, в этом смысле значительно меньше ограничений существует при выборе потенциальной функции, чем при выборе функции окна. Наиболее часто используется такая потенциальная функция, которая имеет максимум при $\mathbf{x}=\mathbf{x}_i$ и монотонно убывает до нуля при $\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i\|\to\infty$. Однако в случае необходимости и эти ограничения можно снять.

Пусть имеется множество из n выборок, а разделяющая функция сформирована в соответствии с выражением (85). Предположим далее, что при проверке обнаружено, что некоторая выборка, скажем $\mathbf{x}_k$, посредством функции $g(\mathbf{x})$ классифицируется с ошибкой. Попробуем исправить ошибку, изменив немного величину q_k [1]). Предположим, что значение q_k увеличивается на величину единичного заряда, если $\mathbf{x}_k$ помечено символом ω_1, и уменьшается на такую же величину, если $\mathbf{x}_k$ помечено символом ω_2. Если обозначить значение разделяющей функции после коррекции через $g'(\mathbf{x})$, то алгоритм формирования данной функции может быть записан в следующем виде:

$$g'(\mathbf{x})=\begin{cases} g(\mathbf{x})+K(\mathbf{x},\mathbf{x}_k), & \text{если } \mathbf{x}_k \text{ обозначен } \omega_1 \text{ и } g(\mathbf{x}_k)\leqslant 0,\\ g(\mathbf{x})-K(\mathbf{x},\mathbf{x}_k), & \text{если } \mathbf{x}_k \text{ обозначен } \omega_2 \text{ и } g(\mathbf{x}_k)\geqslant 0,\\ g(\mathbf{x}) & \text{в противном случае.}\end{cases} \quad (86)$$

Данное правило коррекции ошибок имеет много общего с правилом постоянных приращений. Природа этой связи станет вполне понятна, если представить $K(\mathbf{x},\mathbf{x}_k)$ в виде симметричного конечного разложения

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}_k)=\sum_{j=1}^{\hat{d}} y_j(\mathbf{x})\,y_j(\mathbf{x}_k)=\mathbf{y}_k^t\mathbf{y}, \quad (87)$$

где $\mathbf{y}=\mathbf{y}(\mathbf{x})$ и $\mathbf{y}_k=\mathbf{y}(\mathbf{x}_k)$. Подставив данное выражение в (85), получим

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^t\mathbf{y},$$

где

$$\mathbf{a}=\sum_{i=1}^{n} q_i\mathbf{y}_i.$$

Более того, алгоритм для вычисления $g'(\mathbf{x})$ на основе использования $g(\mathbf{x})$ представляет лишь ненормированное правило постоянных при-

[1]) Если пики потенциальной функции являются достаточно острыми (по сравнению с расстояниями между ними), то всегда можно изменить величины зарядов таким образом, чтобы все выборки классифицировались правильно. Если же потенциальная функция сравнительно полога и имеет медленно спадающие вершины, то безошибочная классификация не может быть гарантирована.

ращений:

$$\mathbf{a}' = \begin{cases} \mathbf{a}+\mathbf{y}_k, & \text{если } \mathbf{y}_k \text{ помечено символом } \omega_1 \text{ и } \mathbf{a}^t\mathbf{y}_k \leqslant 0, \\ \mathbf{a}-\mathbf{y}_k, & \text{если } \mathbf{y}_k \text{ помечено символом } \omega_2 \text{ и } \mathbf{a}^t\mathbf{y}_k \geqslant 0, \\ \mathbf{a} & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Таким образом, если $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k)$ может быть представлено в виде выражения (87), сходимость доказывается точно так же, как и для правила постоянных приращений. Более того, является очевидным, что при использовании других процедур, таких, как метод релаксаций, метод наименьшей квадратичной ошибки и метод стохастической аппроксимации, можно сразу же получить «параллельные» им процедуры, основанные на применении потенциальных функций; при этом доказательства сходимости таких «параллельных» процедур совершенно аналогичны.

Метод потенциальных функций, конечно, не ограничивается использованием только таких функций, которые имеют вид конечной суммы. Любая подходящая для наших целей функция, такая, например, как

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k) = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + \|\mathbf{x}-\mathbf{x}_k\|^2}$$

или

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k) = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_k\|^2\right],$$

может быть выбрана в качестве потенциальной [1]); разделяющая функция получится, если рассматривать выборки последовательно: $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \ldots, \mathbf{x}^k, \ldots$ и использовать какую-либо итеративную процедуру, например

$$g_{k+1}(\mathbf{x}) = g_k(\mathbf{x}) + r_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) K(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k),$$

где r_k — некоторая функция ошибки.

При практическом применении метода потенциальных функций встречаются те же трудности, что и при использовании оценок парзеновского окна. Необходимо очень внимательно отнестись к выбору потенциальной функции, чтобы получить хорошую интерполяцию между точками выборки. При большом числе выборок появляются значительные трудности, связанные с процессом вычисления. Вообще использование метода потенциальных функций наибо-

[1]) Те, кто знаком с интегральными уравнениями, заметят сходство между $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k)$ и ядром $K(s, t)$. При определенных условиях симметричные ядра можно представить в виде бесконечных рядов $\Sigma\varphi_i(s)\varphi_i(t)/\lambda_i$, где φ_i и λ_i — собственные функции и собственные значения K соответственно (см. Курант и Гильберт, гл. III, 1953). Известные ортогональные функции математической физнкн являются собственными функциями симметричных ядер, и нх часто рекомендуют использовать при формировании потенциальных функций. Однако эти рекомендацни вызваны скорее математическим изяществом, чем практической пользой.

лее оправдано в случае, когда либо число выборок невелико, либо размерность $\mathbf{x}$ достаточно мала, чтобы функцию $g(\mathbf{x})$ можно было представить в виде таблицы дискретных значений $\mathbf{x}$.

5.12. ОБОБЩЕНИЯ ДЛЯ СЛУЧАЯ МНОГИХ КЛАССОВ

5.12.1. МЕТОД КЕСЛЕРА

У нас пока не существует единого универсального метода, с помощью которого можно было бы распространить все процедуры для двух классов на случай многих классов. В разд. 5.2.2 было приведено определение классификатора для случая многих классов, названного линейной машиной; классификация образов осуществляется линейной машиной путем вычисления c линейных разделяющих функций

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^t\mathbf{x} + w_{i0}, \quad i = 1, \ldots, c,$$

при этом $\mathbf{x}$ относится к тому классу, которому соответствует наибольшая $g_i(\mathbf{x})$. Это довольно естественное обобщение с точки зрения результатов, полученных в гл. 2 для задачи с многомерным нормальным распределением. Следующий шаг, очевидно, может быть связан с обобщением понятия линейной разделяющей функции; введем вектор-функцию $\mathbf{y}(\mathbf{x})$, зависящую от $\mathbf{x}$, и напишем выражение

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^t\mathbf{y}, \quad i = 1, \ldots, c, \tag{88}$$

где $\mathbf{x}$ снова ставится в соответствие ω_i, если $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x})$ для всех $j \neq i$.

Обобщение процедур, рассмотренных для линейного классификатора двух классов, на случай линейной машины для многих классов наиболее просто осуществляется при линейно разделяемых выборках. Пусть имеется множество помеченных выборок $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_n$, причем число n_1 выборок, принадлежащих подмножеству $\mathcal{Y}_1$, помечены ω_1, число n_2 выборок, принадлежащих подмножеству $\mathcal{Y}_2$, помечены ω_2, ... и число n_c выборок подмножества $\mathcal{Y}_c$ помечены ω_c. Говорят, что данное множество линейно разделяемо в том случае, если существует такая линейная машина, которая правильно классифицирует все выборки. Далее, если эти выборки линейно разделимы, то существует множество весовых векторов $\hat{\mathbf{a}}_1, \ldots, \hat{\mathbf{a}}_c$, таких, что если $\mathbf{y}_k \in \mathcal{Y}_i$, то

$$\hat{\mathbf{a}}_i^t\mathbf{y}_k > \hat{\mathbf{a}}_j^t\mathbf{y}_k \tag{89}$$

для всех $j \neq i$.

Одним из преимуществ такого определения является то, что, несколько видоизменив неравенства (89), можно свести задачу для многих классов к случаю двух классов. Предположим на минуту,

что $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_1$, так что выражение (89) принимает вид

$$\hat{\mathbf{a}}_1^t \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}_j^t \mathbf{y} > 0, \quad j = 2, \ldots, c. \tag{90}$$

Это множество $(c-1)$ неравенств можно интерпретировать как требование существования $c\hat{d}$-мерного весового вектора

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{a}_c \end{bmatrix},$$

который бы правильно классифицировал все $(c-1)$ $c\hat{d}$-мерных выборок

$$\boldsymbol{\eta}_{12} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ -\mathbf{y} \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\eta}_{13} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ -\mathbf{y} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \ldots, \quad \boldsymbol{\eta}_{1c} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -\mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

В более общем случае, если $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i$, то формируется $(c-1)$ $c\hat{d}$-мерных выборок $\boldsymbol{\eta}_{ij}$ с разбиением $\boldsymbol{\eta}_{ij}$ на $\hat{cd}$-мерные подвекторы, причем i-й подвектор равен $\mathbf{y}$, j-й равен $-\mathbf{y}$, а все остальные являются нулевыми. Очевидно, что если $\hat{\boldsymbol{\alpha}}^t \boldsymbol{\eta}_{ij} > 0$ для всех $j \neq i$, то линейная машина, соответствующая компонентам вектора $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$, будет правильно классифицировать $\mathbf{y}$.

В описанной процедуре, которая была предложена К. Кеслером, размерность исходных данных увеличивается в c раз, а число выборок — в $c-1$ раз; это делает ее непосредственное применение достаточно трудоемким и поэтому малопригодным. Значение же данного метода определяется тем, что он позволяет свести процедуру коррекции ошибок в задаче многих классов к случаю двух классов, а последнее чрезвычайно важно для доказательства сходимости указанной процедуры.

5.12.2. ПРАВИЛО ПОСТОЯННЫХ ПРИРАЩЕНИЙ

В данном пункте для доказательства сходимости обобщенного на случай линейной машины правила постоянных приращений используется метод Кеслера. Пусть имеется множество n линейно разделяемых выборок $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$; сформируем на их основе бесконечную последовательность, в которой каждая из выборок по-

является бесконечное множество раз. Обозначим через L_k линейную машину с весовыми векторами $\mathbf{a}_1(k), \ldots, \mathbf{a}_c(k)$. Начиная с исходной, произвольно выбранной линейной машины L_1 и используя последовательность выборок, сформируем последовательность линейных машин, сходящуюся к решающей линейной машине, причем эта последняя будет классифицировать все выборки правильно. Предложим правило коррекции ошибок, в соответствии с которым изменения весов производятся только в том случае, если текущая линейная машина делает ошибку при классификации одной из выборок. Обозначим k-ю выборку, которой необходима коррекция, через $\mathbf{y}^k$ и предположим, что $\mathbf{y}^k \in \mathcal{Y}_i$. Поскольку коррекция вызвана ошибкой при классификации $\mathbf{y}^k$, то должно существовать по крайней мере одно $j \neq i$, для которого

$$\mathbf{a}_i(k)^t \mathbf{y}^k \leqslant \mathbf{a}_j(k)^t \mathbf{y}^k. \tag{91}$$

Тогда правило постоянных приращений для коррекции L_k примет вид

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{a}_i(k+1) = \mathbf{a}_i(k) + \mathbf{y}^k, \\ &\mathbf{a}_j(k+1) = \mathbf{a}_j(k) - \mathbf{y}^k, \\ &\mathbf{a}_l(k+1) = \mathbf{a}_l(k), \quad l \neq i \text{ и } l \neq j. \end{aligned}\right\} \tag{92}$$

Покажем теперь, что данное правило должно привести к решающей машине после конечного числа коррекций. Доказательство проводится достаточно просто. Каждой линейной машине соответствует весовой вектор

$$\boldsymbol{\alpha}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1(k) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{a}_c(k) \end{bmatrix}. \tag{93}$$

Для каждой выборки $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i$ существуют $c-1$ выборок $\boldsymbol{\eta}_{ij}$ (правило их формирования описано в предыдущем пункте). В частности, для вектора $\mathbf{y}^k$, удовлетворяющего неравенствам (91), существует вектор

$$\boldsymbol{\eta}_{ij}^k = \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{y}^k \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -\mathbf{y}^k \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \\ \\ \leftarrow j \\ \\ \\ \end{matrix},$$

удовлетворяющий условию

$$\alpha_k^t \eta_{ij}^k \leqslant 0.$$

Более того, правило постоянных приращений для коррекции L_k в точности совпадает с таким же правилом для коррекции α_k, т. е.

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \eta_{ij}^k.$$

Таким образом, мы пришли к полному соответствию между случаем многих классов и случаем двух классов; при этом в процедуре для многих классов используется последовательность выборок $\eta^1, \eta^2, \ldots, \eta^k, \ldots$ и последовательность весовых векторов $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k, \ldots$. В соответствии с результатами, полученными для случая двух классов, последняя из указанных последовательностей не может быть бесконечной и должна заканчиваться вектором решения. Следовательно, и последовательность $L_1, L_2, \ldots, L_k, \ldots$ должна приходить к решающей машине после конечного числа коррекции.

Использование метода Кеслера для установления эквивалентности процедур для случаев двух и многих классов представляет собой мощное теоретическое средство. Он может быть использован для распространения на случай многих классов тех результатов, которые были получены ранее при исследовании процедур персептрона и метода релаксаций. То же утверждение справедливо и для правил коррекции ошибок в методе потенциальных функций. К сожалению, непосредственное использование изложенной методики невозможно для обобщения метода наименьших квадратов и линейного программирования.

5.12.3. ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

По-видимому, наиболее простым способом обобщения метода наименьших квадратов для случая многих классов является такой, при котором исходная задача сводится к рассмотрению множества из c задач для двух классов. Первая задача данного множества состоит в том, чтобы получить весовой вектор $\mathbf{a}_i$, который является решением в смысле минимума квадрата ошибки уравнений

$$\left.\begin{array}{ll} \mathbf{a}_i^t \mathbf{y} = 1 & \text{для всех } \mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{y} = -1 & \text{для всех } \mathbf{y} \notin \mathcal{Y}_i. \end{array}\right\}$$

На основе результатов п. 5.8.3 можно сказать, что при очень большом числе выборок получается наилучшее в смысле минимума среднеквадратичной ошибки приближение для байесовской разделяющей функции

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}) - P(\text{не } \omega_i \mid \mathbf{x}) = 2P(\omega_i \mid \mathbf{x}) - 1.$$

Отсюда немедленно вытекают два следствия. Первое: если несколько изменить постановку i-й задачи, то она будет звучать так: найти весовой вектор $\mathbf{a}_i$, который является решением в смысле минимума квадрата ошибки уравнений

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{a}_i^t \mathbf{y} = 1 \text{ для всех } \mathbf{y} \in \mathcal{Y}_i, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{y} = 0 \text{ для всех } \mathbf{y} \notin \mathcal{Y}_i, \end{array}\right\} \tag{94}$$

при этом $\mathbf{a}^t\,\mathbf{y}$ будет наилучшим приближением для $P(\omega_i|\mathbf{x})$ по критерию минимума среднеквадратичной ошибки. Второе: вполне оправданным является использование решающих разделяющих функций в линейной машине, которая относит $\mathbf{y}$ к классу ω_i при условии $\mathbf{a}_i^t\,\mathbf{y} > \mathbf{a}_j^t\,\mathbf{y}$ для всех $j \neq i$. Псевдообращение для решения задачи минимизации квадрата ошибки в случае многих классов можно представить в виде, аналогичном случаю двух классов. Пусть Y будет матрицей размера $n \times \hat{d}$, которая может быть разбита на блоки следующим образом:

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ Y_c \end{bmatrix}, \tag{95}$$

причем выборки, помеченные символом ω_i, включают в себя строки Y_i. Далее обозначим через A матрицу размера $\hat{d} \times c$ весовых векторов

$$A = [\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \ldots \mathbf{a}_c] \tag{96}$$

и через B матрицу размера $n \times c$

$$B = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ B_c \end{bmatrix}, \tag{97}$$

где все элементы B_i являются нулевыми, за исключением элементов i-го столбца, равных 1. Тогда след квадратичной матрицы ошибок $(YA-B)^t(YA-B)$ будет минимален при решении [1])

$$A = Y^\dagger B, \tag{98}$$

где, как обычно, $Y^\dagger$ есть псевдообращение матрицы Y.

[1]) Если i-й столбец B обозначить через $\mathbf{b}_i$, след матрицы $(YA-B)^t(YA-B)$ эквивалентен сумме квадратов длин векторов ошибок $Y\mathbf{a}_i - \mathbf{b}_i$. Решение $A = Y^\dagger B$ минимизирует не только всю сумму, но и каждый член этой суммы.

Полученный результат может быть обобщен в форме, интересной с теоретической точки зрения. Обозначим через λ_{ij} потери для случая, когда принято решение ω_i, а истинным является решение ω_j, и предположим, что j-я подматрица B задается выражением

$$B_j = -\begin{bmatrix} \lambda_{1j} & \lambda_{2j} & \dots & \lambda_{cj} \\ \lambda_{1j} & \lambda_{2j} & \dots & \lambda_{cj} \\ \vdots & & & \\ \lambda_{1j} & \lambda_{2j} & \dots & \lambda_{cj} \end{bmatrix} \Big\uparrow \Big\downarrow n_j, \quad j = 1, \dots, c. \tag{99}$$

Тогда если число выборок стремится к бесконечности, то решение $A = Y^{\dagger} B$ дает разделяющие функции $\mathbf{a}_j^t\mathbf{y}$, которые обеспечивают оптимальное в смысле минимума среднеквадратичной ошибки приближение байесовской разделяющей функции

$$g_{0i}(\mathbf{x}) = -\sum_{j=1}^{c} \lambda_{ij} P(\omega_j \mid \mathbf{x}). \tag{100}$$

Доказательство этого результата можно получить, если распространить на рассматриваемый случай метод, использованный в п. 5. 8. 3. Следуя сложившейся традиции, предоставим сделать это читателю в качестве самостоятельного упражнения.

5.13. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

В силу того что линейные разделяющие функции чрезвычайно удобны для аналитического исследования, им было посвящено значительно больше работ, чем они того заслуживают. Поэтому приведенный ниже обширный список литературы на эту тему ни в коей мере нельзя считать исчерпывающим. Начало работам на эту тему было положено классической статьей Фишера (1936). Вопросы применения линейных разделяющих функций для классификации образов хорошо изложены в работе Хайлимана (1962). Он же сформулировал задачу отыскания оптимальной (в смысле минимального риска) линейной разделяющей функции и предложил возможные процедуры градиентного спуска [1]), позволяющие получить искомое решение. К сожалению, об этих процедурах почти ничего нельзя сказать, не имея сведений об исходных распределениях, но даже при наличии последних аналитическое исследование оказывается чрезвычайно сложным (ср. Андерсон и Бахадур, 1962).

Во всех упомянутых выше работах был использован статистический подход; вместе с тем в большом количестве публикаций,

[1]) Наша интерпретация итеративных процедур как методов градиентного спуска для минимизации функций критерия явилась результатом влияния идей, изложенных в докладе Блайдона (1967).

которые появились в конце 50-х — начале 60-х годов, задача распознавания образов рассматривалась с иных позиций. Один из подходов основывался на модели работы нервной сети головного мозга, в которой каждый нейрон представлялся в виде порогового элемента, или линейной машины для двух классов. В работах этого направления, начало которому было положено знаменитой публикацией Маккаллока и Питтса (1943), всячески подчеркивалась необходимость безошибочного выполнения функции разделения; большое значение придавалось такому свойству, как приспособляемость или обучаемость. Для повышения качества работы системы в персептроне Розенблатта (Розеиблатт, 1957, 1962; Блок, 1962) были использованы некоторые вспомогательные правила, в соответствии с которыми изменялись весовые коэффициенты нейронов. Наиболее известным из этих правил было правило постоянных приращений, которое гарантировало безошибочность распознавания, когда бы оно ни достигалось. Нильсон (1965) приводит два доказательства теоремы сходимости персептрона и упоминает о нескольких других, в частности об очень изящном и носящем общий характер доказательстве Новикова (1962). Наше доказательство основано на том, которое было дано Ридгуэем (1962). Поведение правила постоянных приращений в задачах с отсутствием разделяемости было проанализировано Эфроном (1964); более доступное изложение можно найти у Минского и Пейперта (1969), а также у Блока и Левина (1970). Простые преобразования с целью повышения качества распознавания в задачах с отсутствием разделяемости были предложены Дудой и Синглтоном (1964) и Бутцем (1967).

В задачах с отсутствием разделяемости часто предполагалось использовать более сложные разделяющие функции и более сложные, иногда составленные случайным образом сети пороговых элементов. Обозначения, которые применялись при описании этих задач, могут быть использованы и при описании работы персептронов более общего класса, таких, например, как различные кусочно линейные классификаторы (Нильсон, 1965; Дуда и Фоссум, 1966; Мангасарян, 1968). К сожалению, анализ таких сетей является чрезвычайно сложной задачей. В работе Хокинса (1961) дан хороший обзор трудов, посвященных проблеме обучения в системах, построенных на основе сетей пороговых элементов, а Минский и Селфридж (1961) проводят критический анализ этих работ.

Для множества ранних работ по распознаванию образов характерен подход, основанный на теории переключений. И здесь основной упор делается на безошибочность выполнения функции разделения. Переключающей схемой, которая наиболее часто предлагалась для использования при распознавании образов, был единственный пороговый элемент; иногда его называли пороговой логической единицей, линейным входным элементом, мажоритарным клапаном или, когда он был адаптивным, адалайном (adaline). Уиндер

(1963) проводит очень хороший обзор работ, относящихся к этому направлению. Стандартные процедуры, используемые для получения переключающих функций, в основном те же, что применяются для решения системы линейных неравенств. Однако некоторые из данных процедур, являющиеся алгебраическими, неприменимы в задачах распознавания образов. Метод релаксаций для решения линейных неревенств был развит Агмоном (1954) и Моцкином и Шёнбергом (1954); использование допуска для получения решения за конечное число шагов было предложено Мейсом (1964).

Тот факт, что системы линейных неравенств могут быть решены с помощью линейного программирования [1]), был отмечен Чарнсом и др. (1953). Минник показал, как можно использовать линейное программирование для определения весов порогового элемента (Минник, 1961), а Мангасарян (1965) предложил использовать данный элемент для классификации образов. Все эти способы либо приводили к решению задачи в замкнутом виде, либо обеспечивали доказательство неразделяемости, при этом никакой полезной информации о возможном решении они не давали. В знаменитой работе Смита (1968) показано, что задача минимизации ошибки персептрона решается методом линейного программирования. Гринолд (1969) указал, что с помощью преобразованного симплекс-метода при ограничении переменных сверху все преимущества вычислительного процесса, свойственные задаче в двойственной постановке, могут быть распространены и на задачу в постановке Смита.

Нельзя сказать, что во всех работах, основанных на теории переключений, решение задачи непременно связывалось с безошибочным выполнением функции разделения. Действительно, в одной из первых работ, где предлагалось использовать при классификации образов адаптивный пороговый элемент, постановка задачи была статистической (Матсон, 1959). Точно так же процедура Видроу — Хоффа для минимизации среднеквадратичной ошибки была впервые описана как статистическая процедура спуска (Видроу и Хофф, 1960), и своим появлением она обязана задаче винеровской фильтрации, возникающей в теории связи и теории управления. Кофорд и Гронер (1966) указали на связь решения, которое получается с помощью метода наименьших квадратов, с линейным дискриминантом Фишера; Паттерсон и Вомак (1966) показали, что это решение является, кроме того, наилучшим в смысле минимума среднеквадратичной ошибки приближением для байесовской разделяющей функции. Тот факт, что с помощью псевдообращения обеспечивается решение задачи в замкнутой форме, был впервые отмечен Хо и Кашьяпом (1965); они же показали связь между решением по

[1]) Имеется прекрасная литература по линейному программированию, например образцовые книги Данцига (1963) и Гасса (1969). Исключительно ясное и достаточно простое изложение можно найти у Гликсмана (1968).

методу наименьших квадратов для классической теории переключений и предложенной ими итеративной процедурой (Хо и Кашьяп, 1965, 1966). Теория псевдообращения (которую иначе называют общим обращением, обобщенным обращением или обращением Мура — Пенроуза) была окончательно оформлена в работах Рао и Митра (1971).

Использование стохастической аппроксимации и метода потенциальных функций для распознавания образов имеет достаточно богатую историю. Метод потенциальных функций впервые был сформулирован Башкировым, Браверманом и Мучником (1964), а дальнейшее свое развитие получил в серии статей Айзермана, Бравермана и Розоноэра. В первых статьях была показана связь между правилом коррекции для потенциальной функции и правилом постоянных приращений (Айзерман и др., 1964а); вскоре после этого была предложена модификация метода, которая позволила получить наилучшее в смысле минимума среднеквадратичной ошибки приближение для байесовской разделяющей функции (Айзерман и др., 1964б). На связь между методом потенциальных функций и стохастической аппроксимацией было указано Цыпкиным (1965) и Айзерманом и др. (1965) и независимо от них Блайдоном (1966). Как показал Айзерман (1969), метод потенциальных функций является довольно общим методом классификации образов; целый ряд методов может быть получен как его модификации. Наибольшее внимание из них привлекла та, в которую входил в качестве составной части метод стохастической аппроксимации. Изложение метода стохастической аппроксимации в его наиболее завершенном виде можно найти у Вазана (1969); более краткое изложение (которое мы настоятельно рекомендуем читателю) — у Уайлда (1964). Прикладные задачи теории классификации образов рассмотрены в работах Блайдона и Хо (1966), Фу (1968), Йа и Шумперта (1968); там же можно найти ссылки на другие работы, посвященные этим вопросам.

При обращении к случаю многих классов достаточно серьезной становится задача выбора соответствующего метода решения, поскольку при использовании одних методов может встретиться больше трудностей, чем при использовании других; в этом смысле различные процедуры не равноценны. Структура линейной машины практически полностью определяется многомерным нормальным решением или даже более простыми классификаторами, использующими в качестве критерия ближайшее среднее значение или максимум корреляционной функции. Такой тип классификатора был использован в первых вариантах устройств считывания информации, записанной с помощью магнитных чернил (Элдридж, Камфёфнер и Вендт, 1956). Исследование функционирования адаптивных вариантов таких устройств началось задолго до того, как были получены доказательства сходимости соответствующих процессов (напри-

мер, доказательство Робертса (1960) и хорошо известная обучающая матрица Штейнбуха (Штейнбух и Писке, 1963)). Как считает Нильсон (1965), приоритет в создании метода Кеслера и получении доказательства сходимости для правила постоянных приращений следует отдать Карлу Кеслеру. Чаплин и Левади (1967) предложили для использования в задачах многих классов модифицированный метод наименьших квадратов; идея метода состоит в отображении векторов $\mathbf{y}$ заданного класса в одну из вершин $(c-1)$-мерного симплекса. Наша трактовка использования метода наименьших квадратов в таких задачах основана на обобщенном обращении Ви (1968). Йа и Шумперт (1968) предложили модифицированный для случая многих классов метод стохастической аппроксимации, а Смит (1969) — процедуру, с помощью которой на этот случай может быть распространен метод линейного программирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Агмон (Agmon S.)
The relaxation method for linear inequalities, *Canadian Journal of Mathematics*, **6**, 382—392 (1954).

Айзерман (Aizerman M. A.)
Remarks on two problems connected with pattern recognition, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 1—10, S. Watanabe, ed. (Academic Press, New York, 1969).

Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И.
Теоретические основы метода потенциальных функций в задаче об обучении автоматов разделению ситуаций на классы, *Автоматика и телемеханика*, **25**, 821—837 (июнь 1964а).

Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И.
Вероятностная задача об обучении автоматов распознаванию классов и метод потенциальных функций, *Автоматика и телемеханика*, **25**, 1175—1193 (сентябрь 1964б).

Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И.
Процесс Роббинса — Монро и метод потенциальных функций, *Автоматика и телемеханика*, **26**, 1882—1885 (ноябрь 1965).

Андерсон, Бахадур (Anderson T. W., Bahadur R. R.)
Classification into two multivariate normal distributions with different covariance matrices, *Ann. Math. Stat.*, **33**, 420—431 (June 1962).

Башкиров О. А., Браверман Э. М., Мучник И. Б.
Алгоритм обучения машин распознаванию зрительных образов, основанный на использовании метода потенциальных функций, *Автоматика и телемеханика*, **25**, 629—631 (май 1964).

Блайдон (Blaydon C. C.)
On a pattern classification result of Aizerman, Braverman, Rozonoer, *IEEE Trans. Info. Theory* (Correspondence), **IT-12**, 82—83 (January 1966).

Блайдон (Blaydon C. C.)
Recursive algorithms for pattern classification, Technical Report № 520, Division of Engineering and Applied Physics, Harvard University, Cambridge, Massachusetts (March 1967).

Блайдон, Хо (Blaydon C. C., Ho Y. C.)
On the abstraction problem in pattern classification, *Proc. NEC*, **22**, 857—862 (October 1966).

Блок (Block H. D.)
The perceptron: a model for brain functioning. I, *Rev. Mod. Phys.*, **34**, 123—135 (January 1962).

Блок, Левин (Block H. D., Levin S. A.)
On the boundedness of an iterative procedure for solving a system of linear inequalities, *Proc. American Mathematical Society*, **26**, 229—235 (October 1970).

Браверман Э. М.
О методе потенциальных функций, *Автоматика и телемеханика*, **26**, 2130—2138 (декабрь 1965).

Бутц (Butz A. R.)
Perceptron type learning algorithms in nonseparable situations, *J. Math. Anal. and Appl.*, **17**, 560—576 (March 1967).

Вазан (Wasan M. T.)
Stochastic Approximation (Cambridge University Press, New York, 1969). [Русский перевод: Стохастическая аппроксимация, «Мир», М., 1972.]

Ви (Wee W. G.)
Generalized inverse approach to adaptive multiclass pattern classification, *IEEE Trans. Comp.*, **C-17**, 1157—1164 (December 1968).

Видроу, Хофф (Widrow B., Hoff M. E.)
Adaptive switching circuits, 1960 *IRE WESCON Conv. Record*, Part 4, 96—104 (August 1960).

Гасс (Gass S. I.)
Linear Programming (Third Edition, McGraw-Hill, New York, 1969). [Русский перевод: Линейное программирование, Физматгиз, М., 1961.]

Гликсман (Glicksman A. M.)
Linear Programming and the Theory of Games (John Wiley, New York, 1963).

Гринолд (Grinold R. C.)
Comment on 'Pattern classification design by linear programming,' *IEEE Trans. Comp.* (Correspondence), **C-18**, 378—379 (April 1969).

Данциг (Dantzig G. B.)
Linear Programming and Extensions (Princeton University Press, Princeton, N. J., 1963). [Русский перевод: Линейное программирование, его обобщение и применение, М., «Прогресс», 1966.]

Дуда, Синглтон (Duda R. O., Singleton R. C.)
Training a threshold logic unit with imperfectly classified patterns, WESCON Paper 3.2 (August 1964).

Дуда, Фоссум (Duda R. O., Fossum H.)
Pattern classification by iteratively determined linear and piecewise linear discriminant functions, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-15**, 220—232 (April 1966). [Русский перевод: Классификация изображений при помощи итеративно определяемой линейной и кусочно-линейной классифицирующих функций.— *Экспресс-информация*. Техническая кибернетика, ВИНИТИ АН СССР, 1966, № 35, реферат 138.]

Йа, Шумперт (Yau S. S., Schumpert J. M.)
Design of pattern classifiers with the updating property using stochastic approximation techniques, *IEEE Trans. Comp.*, **C-17**, 861—872 (September 1968).

Кофорд, Гронер (Koford J. S., Groner G. F.)
The use of an adaptive threshold element to design a linear optimal pattern classifier, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-12**, 42—50 (January 1966).

Курант, Гильберт (Courant R., Hilbert D.)
Methods of Mathematical Physics (Interscience Publishers, New York, 1953). [Русский перевод в книге: Курант Р., Уравнения с частными производными, «Мир», М., 1964.]

Маккаллок, Питтс (McCulloch W. S., Pitts W. H.)
A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Math. Biophysics*, **5**, 115—133 (1943). [Русский перевод: Логическое исчисление

идей, относящихся к нервной активности, сб. «Автоматы», М., ИЛ, 1956, стр. 362—384.]

Мангасарян (Mangasarian O. L.)
Linear and nonlinear separation of patterns by linear programming, *Operations Research*, **13**, 444—452 (May—June 1965).

Мангасарян (Mangasarian O. L.)
Multisurface method of pattern separation, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 801—807 (November 1968).

Маттсон (Mattson R. L.)
A self-organizing binary system, *Proc. EJCC*, 212—217 (December 1959).

Мейс (Mays C. H.)
Effects of adaptation parameters on convergence time and tolerance for adaptive threshold elements, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-13**, 465—468 (August 1964).

Минник (Minnick R. C.)
Linear-input logic, *IRE Tranc. Elec. Comp.*, **EC-10**, 6—16 (March 1961).

Минский, Пейперт (Minsky M., Papert S.)
Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry (MIT Press, Cambridge, Mass., 1969). [Русский перевод: Персептроны, М., «Мир», 1971.]

Минский, Селфридж (Minsky M., Selfridge O. G.)
Learning in random nets, in Information Theory (Fourth London Symposium), pp. 335—347, C. Cherry, ed. (Butterworths, London, 1961).

Моцкин, Шёнберг (Motzkin T. S., Schoenberg I. J.)
The relaxation method for linear inequalities, *Canadian Journal of Mathematics*, **6**, 393—404 (1954).

Нильсон (Nilsson N. J.)
Learning Machines: Foundations of Trainable Pattern-Classifying Systems (McGraw-Hill, New York, 1965). [Русский перевод: Обучающиеся машины, М., «Мир», 1967.]

Новиков (Novikoff A. B. J.)
On convergence proofs for perceptrons, Proc. Symp. on Math. Theory of Automata, pp. 615—622 (Polytechnic Institute of Brooklyn, Brooklyn, New York, 1962).

Паттерсон, Вомак (Patterson J. D., Womack B. F.)
An adaptive pattern classification system, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.* **SSC-2**, 62—67 (August 1966).

Рао, Митра (Rao C. R., Mitra S. K.)
Generalized Inverse of Matrices and its Applications (John Wiley, New York, 1971).

Ридгуэй (Ridgway W. C.)
An adaptive logic system with generalizing properties, Technical Report 1556-1, Stanford Electronics Laboratories, Stanford University, Stanford, Calif. (April 1962).

Робертс (Roberts L. G.)
Pattern recognition with an adaptive network, IRE International Conv. Rec., Part 2, 66—70 (1960).

Розенблатт (Rosenblatt F.)
The perceptron — a perceiving and recognizing automaton, Report 85-460-1, Cornell Aeronautical Laboratory, Ithaca, New York (January 1957).

Розенблатт (Rosenblatt F.)
Principles of Neurodynamics: Perceptrons and the theory of brain mechanisms (Spartan Books, Washington, D. C., 1962). [Русский перевод: Принципы нейродинамики (перцептроны и теория механизмов мозга), М., «Мир», 1965.]

Смит (Smith F. W.)
Pattern classifier design by linear programming. *IEEE Trans. on Comp.*, **C-17**, 367—372 (April 1968).

Смит (Smith F. W.)
Design of multicategory pattern classifiers with two-category classifier design procedures, *IEEE Trans. Comp.*, **C-18**, 548—551 (June 1969).

Уайлд (Wilde D. G.)
Optimum Seeking Methods (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1964).
Уиндер (Winder R. O.)
Threshold logic in artificial intelligence, Artificial Intelligence (A combined preprint of papers presented at the IEEE Winter General Meeting), pp. 108—128 (January 1963).
Фишер (Fisher R. A.)
The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Ann. Eugenics*, **7**, Part II, 179—188 (1936); also in Contributions to Mathematical Statistics (John Wiley, New York, 1950).
Фу (Fu K. S.)
Sequential Methods in Pattern Recognition and Machine Learning (Academic Press, New York, 1968).
Хайлиман (Highleyman W. H.)
Linear decision functions, with application to pattern recognition, *Proc. IRE*, **50**, 1501—1514 (June 1962).
Хо, Кашьян (Ho Y. C., Kashyap R. L.)
An algorithm for linear inequalities and its applications, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-14**, 683—688 (October 1965).
Хо, Кашьян (Ho Y. C., Kashyap R. L.)
A class of iterative procedures for linear inequalities, *J. SIAM Control*, **4**, 112—115 (1966).
Хокинс (Hawkins J. K.)
Self-organizing systems — a review and commentary, *Proc. IRE*, **49**, 31—48 (January 1961).
Цыпкин Я. З.
О восстановлении характеристик функционального преобразователя по случайно наблюдаемым точкам, *Автоматика и телемеханика*, **26**, 1878—1881 (ноябрь 1965).
Чаплин, Левади (Chaplin W. G., Levadi V. S.)
A generalization of the linear threshold decision algorithm to multiple classes, in Computer and Information Sciences — II, pp. 337—354, J. T. Tou, ed. (Academic Press, New York, 1967).
Чарнс, Купер и Хендерсон (Charnes A., Cooper W. W., Henderson A.)
An Introduction to Linear Programming (John Wiley, New York, 1953).
Штейнбух и Писке (Steinbuch K., Piske U. A. W.)
Learning matrices and their applications, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-12**, 846—862 (December 1963).
Элдридж, Камфёфнер и Вендт (Eldredge K. R., Kamphoefner F. J., Wendt P. H.)
Automatic input for business data processing systems, *Proc. EJCC*, 69—73 (December 1956).

Задачи

1. а) Покажите, что расстояние между гиперплоскостью $g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t\mathbf{x}+w_0=0$ и точкой $\mathbf{x}$ при наличии ограничения $g(\mathbf{x}_q)=0$ может быть сделано равным $|g(\mathbf{x})|/\|\mathbf{w}\|$ путем минимизации $\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_q\|^2$.

б) Покажите, что проекция вектора $\mathbf{x}$ на гиперплоскость задается выражением

$$\mathbf{x}_p=\mathbf{x}-\frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|^2}\mathbf{w}.$$

2. Рассмотрим линейную машину для трех классов с разделяющими функциями вида $g_i(\mathbf{x})=\mathbf{w}_i\mathbf{x}+w_{i0}$, $i=1, 2, 3$. Случай, когда размериость $\mathbf{x}$ равна 2 и величины порогов w_0 равны нулю, схематически изобразим так: весовые векторы изобразим отрезками, которые сходятся в начале координат; соединим на-

чала этих отрезков и проведем границу области решений. Как изменится этот рисунок, если к каждому из весовых векторов будет добавлен постоянный вектор?

3. В случае многих классов говорят, что множество выборок линейно разделяемо, если существует линейная машина, которая правильно классифицирует все выборки. Если для любого ω_i выборки, помеченные символом ω_i, могут быть отделены от всех остальных с помощью единственной гиперплоскости, будем говорить, что выборки *полностью линейно разделяемы*. Покажите, что полностью линейно разделяемые выборки должны быть линейно разделяемы, но что обратное утверждение неверно. (*Указание*: для проверки второй части утверждения рассмотрите такую же линейную машину, как в задаче двух последовательных разделений выборок.)

4. Говорят, что множество выборок является *попарно линейно разделяемым*, если существуют $c(c-1)/2$ гиперплоскостей H_{ij}, таких, что H_{ij} отделяет выборки, помеченные ω_i, от выборок, помеченных ω_j. Покажите, что множество попарно линейно разделяемых образов может не быть линейно разделяемым. (*Указание*: найдите такие конфигурации выборок, для которых границы области решений являются такими, как на рис. 5.2б.)

5. Рассмотрите линейную машину с разделяющими функциями $g_i(\mathbf{x})=\mathbf{w}_i^t\mathbf{x}+w_{i0}$, $i=1, \ldots, c$. Покажите, что области решения являются выпуклыми, доказав, что если $\mathbf{x}_1 \in \mathcal{R}_i$ и $\mathbf{x}_2 \in \mathcal{R}_i$, то $\lambda\mathbf{x}_1+(1-\lambda)\mathbf{x}_2 \in \mathcal{R}_i$ при $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$.

6. Пусть $\{\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n\}$ — конечное множество линейно разделяемых выборок, а — вектор решения, если $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i \geqslant b$ для всех i. Покажите, что вектор решения минимальной длины есть единичный вектор. (*Указание*: рассмотрите эффект усреднения двух векторов решения.)

7. *Выпуклой оболочкой* множества векторов $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ называют множество всех векторов вида

$$\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{x}_i,$$

где коэффициенты α_i неотрицательны и сумма их равна 1. Заданы два множества векторов. Покажите, что либо они линейно разделяемы, либо их выпуклые оболочки пересекаются. (*Указание*: допустив справедливость обоих утверждений, рассмотрите классификацию точки пересечения выпуклых оболочек.)

8. Говорят, что классификатор является *кусочно линейной машиной*, если его разделяющие функции имеют вид

$$g_i(\mathbf{x})=\max_{j=1, \ldots, n_i} g_{ij}(\mathbf{x}),$$

где

$$g_{ij}(\mathbf{x})=\mathbf{w}_{ij}^t\mathbf{x}+w_{ij0}, \quad i=1, \ldots, c, \quad j=1, \ldots, n_i.$$

а) Укажите, каким образом кусочно линейная машина может быть описана как линейная для классификации подклассов образов.

б) Покажите, что область решения кусочно линейной машины может быть невыпуклой, многосвязной.

9. Пусть d компонент $\mathbf{x}$ равны либо 0, либо 1. Допустим, что мы относим $\mathbf{x}$ к ω_1, если число ненулевых компонент $\mathbf{x}$ нечетно, и к ω_2 — в противном случае. (В теории переключения это называется *функцией четности*.)

а) Покажите, что такая дихотомия не является линейно разделяемой, если $d>1$.

б) Покажите, что данная задача может быть решена с помощью кусочно линейной машины с $d+1$ весовыми векторами (см. задачу 8). (*Указание*: рассмотрите векторы вида $\mathbf{w}_{ij}=\alpha_{ij}\ (1, 1, \ldots, 1)^t$.)

10. При доказательстве сходимости процедуры персептрона масштабный коэффициент α может быть выбран равным β^2/γ. Используя обозначения п. 5.5.2, покажите, что если α больше $\beta^2/2\gamma$, то максимальное число коррекций может быть вычислено по формуле

$$k_0 = \frac{\| \mathbf{a}_1 - \alpha \mathbf{a} \|^2}{2\alpha\gamma - \beta^2}.$$

При каком значении α число k_0 достигает минимального значения для $\mathbf{a}_1=\mathbf{0}$?

11. Опираясь на доказательство сходимости, приведенное в п. 5.5.2, попытайтесь изменить его для того, чтобы доказать сходимость такой процедуры коррекций: задавшись произвольным начальным весовым вектором $\mathbf{a}_1$, корректируем $\mathbf{a}_k$ в соответствии с выражением

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \rho_k \mathbf{y}^k$$

тогда и только тогда, когда $\mathbf{a}_k^t \mathbf{y}^k$ не достигает допуска b, где ρ_k ограничено неравенствами $0<\rho_a\leqslant\rho_k\leqslant\rho_b<\infty$. Что происходит в случае отрицательного b?

12. Пусть $\{\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n\}$ — конечное множество линейно разделяемых выборок. Предложите процедуру, с помощью которой разделяющий вектор может быть получен через конечное число шагов. (*Указание*: рассмотрите весовые векторы, компонентами которых являются целые числа.)

13. Рассмотрим функцию критерия

$$J_q(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} (\mathbf{a}^t \mathbf{y} - b)^2,$$

где $\mathcal{Y}(\mathbf{a})$ — множество выборок, для которых $\mathbf{a}^t\mathbf{y}<b$. Пусть $\mathbf{y}_1$ — единственная выборка в $\mathcal{Y}(\mathbf{a}_k)$. Покажите, что $\nabla J_q(\mathbf{a}_k)=2(\mathbf{a}_k^t\mathbf{y}_1-b)\mathbf{y}_1$, а матрица вторых частных производных определяется выражением $D=2\mathbf{y}_1\mathbf{y}_1^t$. Используя этот результат, покажите, что если в выражение (8) подставить оптимальное значение ρ_k, то алгоритм градиентного спуска примет вид

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \frac{b - \mathbf{a}^t\mathbf{y}_1}{\| \mathbf{y}_1 \|^2} \mathbf{y}_1.$$

14. Покажите, что при использовании метода наименьших квадратов масштабный коэффициент α в решении, соответствующем разделяющей функции Фишера (п. 5.8.2), определяется выражением

$$\alpha = \frac{1}{1 + \frac{n_1 n_2}{n} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t S_W^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)}.$$

15. Обобщите результаты п. 5.8.3 для того, чтобы показать, что вектор $\mathbf{a}$, который минимизирует функцию критерия

$$J_s'(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_1} (\mathbf{a}^t\mathbf{y} - (\lambda_{21} - \lambda_{11}))^2 + \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}_2} (\mathbf{a}^t\mathbf{y} - (\lambda_{12} - \lambda_{22}))^2,$$

обеспечивает асимптотически наилучшее в смысле минимума среднеквадратичной ошибки приближение для байесовской разделяющей функции $(\lambda_{21}-\lambda_{11})P(\omega_1|\mathbf{x})-(\lambda_{12}-\lambda_{22})P(\omega_2|\mathbf{x})$.

16. Рассмотрим функцию критерия $J_m(\mathbf{a})=E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}(\mathbf{x})-z)^2]$ и байесовскую разделяющую функцию $g_0(\mathbf{x})$.

а) Покажите, что

$$J_m = E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-g_0)^2]-2E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-g_0)(z-g_0)]+E[(z-g_0)^2].$$

б) Используя тот факт, что условное среднее значение z равно $g_0(\mathbf{x})$, покажите, что вектор $\hat{\mathbf{a}}$, минимизирующий J_m, одновременно доставляет минимум функционалу $E[(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-g_0)^2]$.

17. Скалярный аналог отношения $R_{k+1}^{-1}=R_k^{-1}+\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^t$, используемого в методе стохастической аппроксимации, имеет вид $\rho_{k+1}^{-1}=\rho_k^{-1}+y_k^2$. Покажите, что решение в замкнутой форме для данного уравнения имеет вид

$$\rho_k = \frac{\rho_1}{2+\rho_1\sum_{i=1}^{k-1} y_i^2}.$$

Приняв $\rho_1>0$ и $0<a\leqslant y_i^2\leqslant b<\infty$, покажите, почему указанная последовательность коэффициентов удовлетворяет соотношениям

$$\Sigma\rho_k\longrightarrow+\infty \quad \text{и} \quad \Sigma\rho_k^2\longrightarrow L<\infty.$$

18. Задача линейного программирования, сформулированная в п. 5.10.2, включала в себя минимизацию единственной искусственной переменной t при ограничениях $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i+t>b_i$ и $t\geqslant 0$. Покажите, что результирующий весовой вектор минимизирует функцию критерия

$$J_t(\mathbf{a})=\max_{\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i\leqslant b_i}[b_i-\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i].$$

19. Предложите обобщение на случай многих классов метода потенциальных функций, включающего c разделяющих функций; предложите итеративную процедуру коррекции ошибок для определения разделяющих функций.

Глава 6

ОБУЧЕНИЕ БЕЗ УЧИТЕЛЯ И ГРУППИРОВКА

6.1. ВВЕДЕНИЕ

До сих пор мы предполагали, что обучающие выборки, используемые для создания классификатора, были помечены, чтобы показать, к какой категории они принадлежат. Процедуры, использующие помеченные выборки, называются процедурами с учителем. Теперь рассмотрим процедуры без учителя, использующие непомеченные выборки. То есть мы посмотрим, что можно делать, имея набор выборок без указания их классификации.

Возникает вопрос: целесообразна ли такая малообещающая задача и возможно ли в принципе обучить чему-либо по непомеченным выборкам. Имеются три основные причины, по которым мы интересуемся процедурами без учителя. Во-первых, сбор и пометка большого количества выборочных образов требуют много средств и временн. Если классификатор можно в первом приближении создать на небольшом помеченном наборе выборок и после этого его «настроить» на использование без учителя на большом непомеченном наборе, мы сэкономим много труда и времени. Во-вторых, во многих практических задачах характеристики образов медленно изменяются во времени. Если такие изменения можно проследить классификатором, работающим в режиме обучения без учителя, это позволяет повысить качество работы. В-третьих, на ранних этапах исследования иногда бывает интересно получить сведения о внутренней природе или структуре данных. Выделение четких подклассов или основных отклонений от ожидаемых характеристик может значительно изменить подход, принятый при создании классификатора.

Ответ на вопрос, можно или нельзя в принципе обучить чему-либо по непомеченным данным, зависит от принятых предположений — теорему нельзя доказать без предпосылок. Мы начнем с очень ограниченного предположения, что функциональный вид плотностей распределения известен, и единственное, что надо узнать,— это значение вектора неизвестных параметров. Интересно, что формальное решение этой задачи оказывается почти идентичным решению задачи об обучении с учителем, данному в гл. 3. К сожалению, в случае обучения без учителя решение наталкивается на обычные проблемы, связанные с параметрическими предположениями, не способствующими простоте вычислений. Это приводит нас к различ-

ным попыткам дать новую формулировку задачи как задачи разделения данных в подгруппы, или кластеры. Хотя некоторые из результирующих процедур группировки и не имеют большого теоретического значения, они являются одним из наиболее полезных средств решения задач распознавания образов.

6.2. ПЛОТНОСТЬ СМЕСИ И ИДЕНТИФИЦИРУЕМОСТЬ

Начнем с предположения, что мы знаем полную вероятностную структуру задачи, за исключением лишь значений некоторых параметров. Более точно, мы делаем следующие предположения:

1. Выборки производятся из известного числа c классов.
2. Априорные вероятности $P(\omega_j)$ для каждого класса известны, $j=1, \ldots, c$.
3. Вид условных по классам плотностей $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta})$ известен, $j=1, \ldots, c$.
4. Единственные неизвестные — это значения c параметрических векторов $\boldsymbol{\theta}_1, \ldots, \boldsymbol{\theta}_c$.

Предполагается, что выборки получены выделением состояния природы ω_j с вероятностью $P(\omega_j)$ и последующим выделением $\mathbf{x}$ в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta})$.

Таким образом, функция плотности распределения выборок определяется как

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j) P(\omega_j), \tag{1}$$

где $\boldsymbol{\theta}=(\boldsymbol{\theta}_1, \ldots, \boldsymbol{\theta}_c)$. Функция плотности такого вида называется *плотностью смеси*. Условные плотности $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j)$ называются *плотностями компонент*, а априорные вероятности $P(\omega_j)$ — *параметрами смеси*. Параметры смеси можно включить и в неизвестные параметры, но на данный момент мы предположим, что неизвестно только $\boldsymbol{\theta}$.

Наша основная цель — использовать выборки, полученные согласно плотности смеси, для оценки неизвестного вектора параметров $\boldsymbol{\theta}$. Если мы знаем $\boldsymbol{\theta}$, мы можем разложить смесь на компоненты, и задача решена. До получения явного решения задачи выясним, однако, возможно ли в принципе извлечь $\boldsymbol{\theta}$ из смеси. Предположим, что мы имеем неограниченное число выборок и используем один из непараметрических методов гл. 4 для определения значения $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ для каждого $\mathbf{x}$. Если имеется только одно значение $\boldsymbol{\theta}$, которое дает наблюденные значения для $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$, то в принципе решение возможно. Однако если несколько различных значений $\boldsymbol{\theta}$ могут дать одни и те же значения для $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$, то нет надежды получить единственное решение.

Эти рассмотрения приводят нас к следующему определению: плотность $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ считается *идентифицируемой*, если из $\boldsymbol{\theta} \neq \boldsymbol{\theta}'$

следует, что существует $\mathbf{x}$, такой, что $p(\mathbf{x}|\theta) \neq p(\mathbf{x}|\theta')$. Как можно ожидать, изучение случая обучения без учителя значительно упрощается, если мы ограничиваемся идентифицируемыми смесями. К счастью, большинство смесей с обычно встречающимися функциями плотности идентифицируемо. Смеси с дискретным распределением не всегда так хороши. В качестве простого примера рассмотрим случай, где x бинарен и $P(x|\theta)$— смесь:

$$P(x|\theta) = \frac{1}{2}\theta_1^x(1-\theta_1)^{1-x} + \frac{1}{2}\theta_2^x(1-\theta_2)^{1-x} = \begin{cases} \frac{1}{2}(\theta_1+\theta_2), & \text{если } x=1, \\ 1-\frac{1}{2}(\theta_1+\theta_2), & \text{если } x=0. \end{cases}$$

Если мы знаем, например, что $P(x=1|\theta)=0{,}6$ и, следовательно, $P(x=0|\theta)=0{,}4$, то мы знаем функцию $P(x|\theta)$, но не можем определить θ и поэтому не можем извлечь распределение компонент. Самое большее, что мы можем сказать, — это что $\theta_1+\theta_2=1{,}2$. Таким образом, мы имеем случай, в котором распределение смеси неидентифицируемо, и, следовательно, это случай, в котором обучение без учителя в принципе невозможно.

Как правило, при дискретных распределениях возникает такого рода проблема. Если в смеси имеется слишком много компонент, то неизвестных может быть больше, чем независимых уравнений, и идентифицируемость становится сложной задачей. Для непрерывного случая задачи менее сложные, хотя иногда и могут возникнуть небольшие трудности. Таким образом, в то время как можно показать, что смеси с нормальной плотностью обычно идентифицируемы, параметры в простой плотности смеси

$$p(x|\theta) = \frac{P(\omega_1)}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}(x-\theta_1)^2\right] + \frac{P(\omega_2)}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}(x-\theta_2)^2\right]$$

не могут быть идентифицированы однозначно, если $P(\omega_1)=P(\omega_2)$, так как тогда θ_1 и θ_2 могут взаимно заменяться, не влияя на $p(x|\theta)$. Чтобы избежать таких неприятностей, мы признаем, что идентифицируемость является самостоятельной задачей, но в дальнейшем предполагаем, что плотности смеси, с которыми мы работаем, идентифицируемы.

6.3. ОЦЕНКИ ПО МАКСИМУМУ ПРАВДОПОДОБИЯ

Предположим теперь, что нам дано множество $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$ n непомеченных выборок, извлеченных независимо из смеси с плотностью

$$p(\mathbf{x}|\theta) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \theta_j)\,P(\omega_j), \qquad (1)$$

где вектор параметров θ фиксирован, но неизвестен. Правдоподобие наблюдаемых выборок по определению — это совместная плотность

$$p(\mathcal{X} \mid \theta) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k \mid \theta). \tag{2}$$

Оценка по максимуму правдоподобия $\hat{\theta}$ — это то значение θ, которое максимизирует $p(\mathcal{X} \mid \theta)$.

Если мы предположим, что $p(\mathcal{X} \mid \theta)$ — дифференцируемая функция по θ, то можем получить некоторые интересные необходимые условия для $\hat{\theta}$. Пусть l — логарифм правдоподобия, и пусть $\nabla_{\theta_i} l$ — градиент l по отношению к θ_i. Тогда

$$l = \sum_{k=1}^{n} \log p(\mathbf{x}_k \mid \theta) \tag{3}$$

и

$$\nabla_{\theta_i} l = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{p(\mathbf{x}_k \mid \theta)} \nabla_{\theta_i} \left[\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \ \theta_j) P(\omega_j) \right].$$

Если мы предположим, что элементы векторов θ_i и θ_j функционально независимы при $i \neq j$, и если вводим апостериорную вероятность

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \ \theta_i) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \ \theta_i) P(\omega_i)}{p(\mathbf{x}_k \mid \theta)}, \tag{4}$$

то видим, что градиент логарифма правдоподобия можно записать в удобной форме:

$$\nabla_{\theta_i} l = \sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \ \theta_i) \nabla_{\theta_i} \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \ \theta_i). \tag{5}$$

Поскольку градиент должен обратиться в нуль при θ_i, которое максимизирует l, оценка по максимуму правдоподобия $\hat{\theta}_i$ должна удовлетворять условиям

$$\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \ \hat{\theta}_i) \nabla_{\theta_i} \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \ \hat{\theta}_i) = 0, \ i = 1, \ \ldots, \ c. \tag{6}$$

Обратно, среди решений этих уравнений для $\hat{\theta}_i$ мы найдем решение, удовлетворяющее максимуму правдоподобия.

Нетрудно обобщить эти результаты, включив априорные вероятности $P(\omega_i)$ в неизвестные величины. В этом случае поиск максимального значения $p(\mathcal{X} \mid \theta)$ распространяется на θ и $P(\omega_i)$ при ограничениях

$$P(\omega_i) \geqslant 0, \quad i = 1, \ \ldots, \ c, \tag{7}$$

и

$$\sum_{j=1}^{c} P(\omega_i) = 1. \tag{8}$$

Пусть $\hat{P}(\omega_i)$— оценка по максимуму правдоподобия для $P(\omega_i)$, и пусть $\hat{\theta}_i$— оценка по максимуму правдоподобия для θ_i. Прилежный читатель сможет показать, что если функция правдоподобия дифференцируема и если $\hat{P}(\omega_i) \neq 0$ для любого i, то $\hat{P}(\omega_i)$ и $\hat{\theta}_i$ должны удовлетворять соотношениям

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i) \tag{9}$$

и

$$\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i) \nabla_{\theta_i} \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\theta}_i) = 0, \tag{10}$$

где

$$\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\theta}_i) \hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\theta}_j) \hat{P}(\omega_j)}. \tag{11}$$

6.4. ПРИЛОЖЕНИЕ К СЛУЧАЮ НОРМАЛЬНЫХ СМЕСЕЙ

Посмотрим, как эти общие результаты применяются в случае, когда плотности компонент нормально распределены, $p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)$. Следующая таблица иллюстрирует несколько различных ситуаций, которые могут возникнуть в зависимости от того, какие параметры известны ($\surd$) и какие неизвестны (?):

Случай	$\boldsymbol{\mu}_i$	Σ_i	$P(\omega_i)$	c
1	?	$\surd$	$\surd$	$\surd$
2	?	?	?	$\surd$
3	?	?	?	?

Случай 1 самый простой, и мы его рассмотрим подробно из педагогических соображений. Случай 2 более реальный, хотя несколько более сложный. Случай 3 представляет собой задачу, которая возникает, когда мы сталкиваемся с полностью неизвестным множеством данных. К сожалению, он не может быть решен методами максимума правдоподобия. Мы отложим на конец главы обсуждение того, что можно сделать, когда число классов неизвестно.

6.4.1. СЛУЧАЙ 1. НЕИЗВЕСТНЫ СРЕДНИЕ ВЕКТОРЫ

Если единственными неизвестными величинами являются векторы средних значений $\boldsymbol{\mu}_i$, то $\boldsymbol{\theta}_i$ можно идентифицировать с $\boldsymbol{\mu}_i$ и использовать соотношения (6) для получения необходимых условий оценки по максимуму правдоподобия вектора $\boldsymbol{\mu}_i$. Поскольку

$$\log p(\mathbf{x} \mid \omega_i, \boldsymbol{\mu}_i) = -\log\left[(2\pi)^{d/2} \mid \Sigma_i \mid^{1/2}\right] - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i),$$

то

$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}_i} \log p(\mathbf{x} \mid \omega_i, \boldsymbol{\mu}_i) = \Sigma_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i).$$

Таким образом, из условия (6) для оценки по максимуму правдоподобия $\hat{\boldsymbol{\mu}}_j$ получим

$$\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i) = \sum_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i) = 0.$$

После умножения на Σ_j и перестановки членов получаем формулу

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)\,\mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)}, \tag{12}$$

которая интуитивно оправданна. Она показывает, что оценка для $\boldsymbol{\mu}_i$ — это просто взвешенное среднее выборок. Вес k-й выборки есть оценка правдоподобия того, что $\mathbf{x}_k$ принадлежит i-му классу. Если оказалось, что $P(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})$ равно единице для нескольких выборок и нулю для остальных, то $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ есть среднее выборок, которые оценены как принадлежащие i-му классу. В более общем смысле предположим, что $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ достаточно близко к действительному значению $\boldsymbol{\mu}_i$ и что $P(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)$ есть в сущности верная апостериорная вероятность для ω_i. Если рассматривать $P(\omega_i|\mathbf{x}_k\ \hat{\boldsymbol{\mu}})$ как долю тех выборок, имеющих значение $\mathbf{x}_k$, которые принадлежат i-му классу, то видим, что соотношение (12) определяет $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ как среднее выборок i-го класса.

К сожалению, соотношение (12) не определяет $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ явно, и если мы подставим

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)\,P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\boldsymbol{\mu}}_j)\,P(\omega_j)}$$

с $p(\mathbf{x}|\omega_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i) \sim N(\hat{\boldsymbol{\mu}}_i, \Sigma_i)$, то получим сложную комбинацию из попарно совместных нелинейных уравнений. Решение этих уравнений обычно не единственно, и мы должны проверить все полученные решения, чтобы найти то, которое действительно максимизирует правдоподобие.

Если у нас есть какой-то способ получения достаточно хороших начальных оценок $\hat{\mu}_i(0)$ для неизвестных средних, уравнение (12) предполагает следующую итерационную схему для улучшения оценки:

$$\hat{\mu}_i(j+1) = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid x_k, \hat{\mu}_i(j))\, x_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid x_k, \hat{\mu}_i(j))}. \qquad (13)$$

Это — градиентный метод подъема или процедура восхождения на вершину для максимизации логарифма функции правдоподобия. Если перекрытие между плотностями компонент невелико, то связь между классами будет малой и сходимость будет быстрой. Однако, когда вычисление закончено, нам достаточно убедиться, что градиент равен 0. Как и все процедуры восхождения на вершину, эта тоже не гарантирует, что найденный максимум — глобальный.

6.4.2. ПРИМЕР

Чтобы продемонстрировать, с какими конкретными вопросами можно встретиться, рассмотрим простую одномерную двухкомпонентную смесь, имеющую нормальную плотность:

$$p(x \mid \mu_1, \mu_2) = \frac{1}{3\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^2\right] + \\ + \frac{2}{3\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(x-\mu_2)^2\right].$$

25 выборок, показанных в табл. 6. 1, были отобраны из этой смеси с $\mu_1 = -2$ и $\mu_2 = 2$.

Таблица 6.1

25 выборок из смеси с нормальным распределением

k	x_k	Класс	k	x_k	Класс
1	0,608	2	13	3,240	2
2	—1,590	1	14	2,400	2
3	0,235	2	15	—2,499	1
4	3,949	2	16	2,608	2
5	—2,249	1	17	—3,458	1
6	2,704	2	18	0,257	2
7	—2,473	1	19	2,569	2
8	0,672	2	20	1,415	2
9	0,262	2	21	1,410	2
10	1,072	2	22	—2,653	1
11	—1,773	1	23	1,396	2
12	0,537	2	24	3,286	2
			25	—0,712	1

Используем эти выборки для вычисления логарифма функции правдоподобия

$$l(\mu_1, \mu_2) = \sum_{k=1}^{n} \log p(x_k | \mu_1, \mu_2)$$

для различных значений μ_1 и μ_2. На рис. 6. 1 показано, как изменяется l в зависимости от μ_1 и μ_2. Максимальное значение l достигается при $\hat{\mu}_1 = -2{,}130$ и $\hat{\mu}_2 = 1{,}668$, которые находятся поблизости

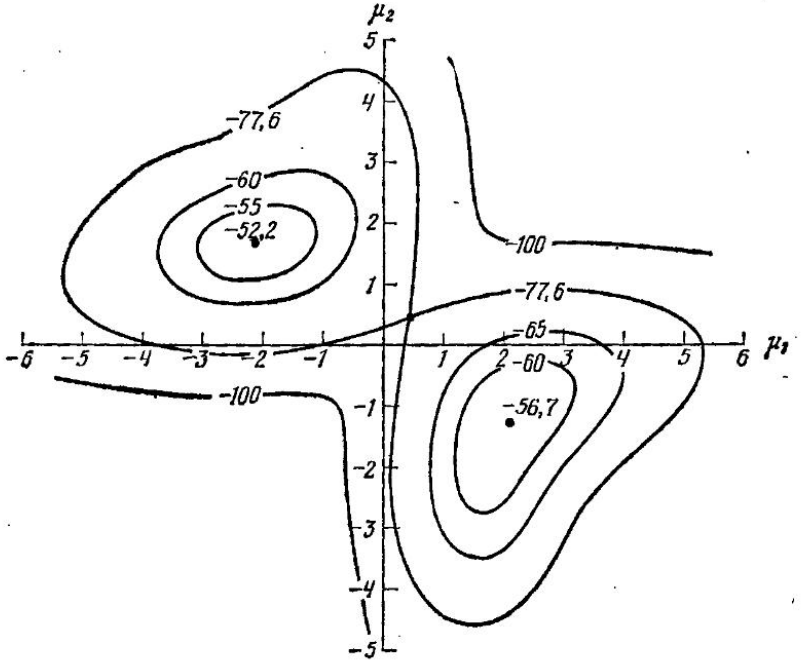


Рис. 6.1. Контуры функции логарифма правдоподобия.

от значений $\mu_1 = -2$ и $\mu_2 = 2$[1]). Однако l достигает другого максимума, сравнимого с первым, при $\hat{\mu}_1 = 2{,}085$ и $\hat{\mu}_2 = -1{,}257$. Грубо говоря, это решение соответствует взаимной замене μ_1 и μ_2. Отметим, что, если бы априорные вероятности были равны, взаимная замена μ_1 и μ_2 не вызвала бы изменения логарифма функции правдоподобия. Таким образом, когда плотность смеси не идентифи-

[1]) Если данные в табл. 6.1 разбить на классы, получим результирующие средние выборок $m_1 = -2{,}176$ и $m_2 = 1{,}684$. Таким образом, оценки по максимуму правдоподобия для обучения без учителя близки к оценкам по максимуму правдоподобия для обучения с учителем.

цируема, решение по максимуму правдоподобия не является единственным.

Можно дополнительно взглянуть на природу этих множественных решений, изучая результирующие оценки плотностей смеси. Рис. 6. 2 показывает истинную плотность смеси и оценки, полученные с использованием оценок по максимуму правдоподобия, как если бы они были истинными значениями параметров. 25 значений выборок показаны в виде точек вдоль оси абсцисс. Отметим, что максимумы как действительной плотности смеси, так и решения по максимуму правдоподобия размещены там же, где расположены две основные группы точек. Оценка, соответствующая меньшему

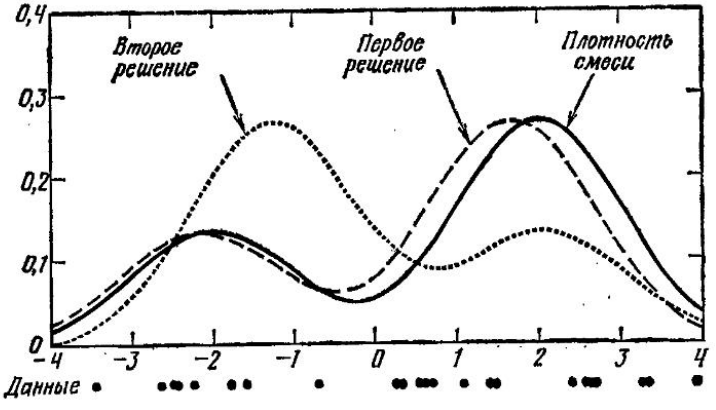


Рис. 6.2. Оценка плотности смеси.

локальному максимуму логарифма функции правдоподобия, представляет собой зеркальное отображение, но ее максимумы также соответствуют группам точек. На первый взгляд ни одно из решений не является явно лучшим, и оба представляют интерес.

Если соотношение (13) используется для итерационного решения уравнения (12), результаты зависят от начальных значений $\hat{\mu}_1(0)$ и $\hat{\mu}_2(0)$. Рис. 6.3 показывает, как различные начальные точки приводят к различным решениям, и дает некоторое представление о степени сходимости. Отметим, что, если $\hat{\mu}_1(0)=\hat{\mu}_2(0)$, мы попадаем в седловую точку за один шаг. Это не случайность. Это происходит по той простой причине, что в этой начальной точке $P(\omega_1|x_k, \hat{\mu}_1(0))=P(\omega_2|x_k, \hat{\mu}_2(0))$. Таким образом, уравнение (13) дает средние для всех выборок $\hat{\mu}_1$ и $\hat{\mu}_2$ при всех последующих итерациях. Ясно, что это общее явление, и такие решения в виде седловой точки можно ожидать, если выбор начальной точки не дает направленного смещения в сторону от симметричного ответа.

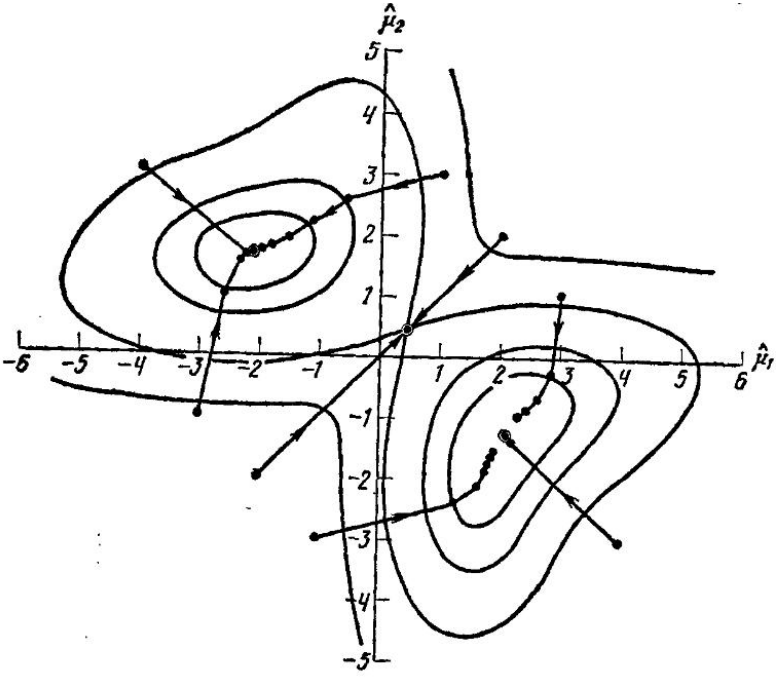


Рис. 6.3. Траектории для итерационной процедуры.

6.4.3. СЛУЧАЙ 2. ВСЕ ПАРАМЕТРЫ НЕИЗВЕСТНЫ

Если $\boldsymbol{\mu}_i$, Σ_i и $P(\omega_i)$ неизвестны и на матрицу ковариаций ограничения не наложены, то принцип максимума правдоподобия дает бесполезные вырожденные решения. Пусть $p(x|\mu, \sigma^2)$ — двухкомпонентная нормальная плотность смеси

$$p(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}x^2\right].$$

Функция правдоподобия для n выборок, полученная согласно этому вероятностному закону, есть просто произведение n плотностей $p(x_k|\mu, \sigma^2)$. Предположим, что $\mu = x_1$, так что

$$p(x_1|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\sigma} + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}x_1^2\right].$$

Ясно, что для остальных выборок

$$p(x_k|\mu, \sigma^2) \geqslant \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}x_k^2\right],$$

так что

$$p(x_1, \ldots, x_n \mid \mu, \sigma^2) \geqslant$$

$$\geqslant \left\{\frac{1}{\sigma} + \exp\left[-\frac{1}{2}x_1^2\right]\right\} \frac{1}{(2\sqrt{2\pi})^n} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k=2}^{n} x_k^2\right].$$

Таким образом, устремляя σ к нулю, мы можем получить произвольно большое правдоподобие, и решение по максимуму правдоподобия будет вырожденным.

Обычно вырожденное решение не представляет интереса, и мы вынуждены заключить, что принцип максимума правдоподобия не работает для этого класса нормальных смесей. Однако эмпирически установлено, что имеющие смысл решения можно все-таки получить, если мы сосредоточим наше внимание на наибольшем из конечных локальных максимумов функции правдоподобия. Предполагая, что функция правдоподобия хорошо себя ведет на таких максимумах, мы можем использовать соотношения (9)—(11), чтобы получить оценки для $\boldsymbol{\mu}_i$, Σ_i и $P(\omega_i)$. Когда мы включаем элементы матрицы Σ_i в элементы вектора параметров θ_i, мы должны помнить, что только половина элементов, находящихся вне диагонали, независимы. Кроме этого, оказывается намного удобней считать неизвестными параметрами независимые элементы матрицы Σ_i^{-1}, а не матрицы Σ_i. После этого дифференцирование

$$\log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \theta_i) = \log \frac{|\Sigma_i^{-1}|^{1/2}}{(2\pi)^{d/2}} - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)$$

по элементам $\boldsymbol{\mu}_i$ и Σ_i^{-1} не представляет труда. Пусть $x_p(k)$—p-й элемент $\mathbf{x}_k$, $\mu_p(i)$—p-й элемент $\boldsymbol{\mu}_i$, $\sigma_{pq}(i)$—pq-й элемент Σ_i и $\sigma^{pq}(i)$ — pq-й элемент Σ_i^{-1}. Тогда

$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}_i} \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \theta_i) = \Sigma_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i),$$

$$\frac{\partial \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \theta_i)}{\partial \sigma^{pq}(i)} = \left(1 - \frac{\delta_{pq}}{2}\right)[\sigma_{pq}(i) - (x_p(k) - \mu_p(i))(x_q(k) - \mu_q(i))],$$

где δ_{pq}— символ Кронекера. Подставляя эти результаты в (10) и проделав некоторые алгебраические преобразования, мы получим следующие выражения для оценок $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$, $\hat{\Sigma}_i$ и $\hat{P}(\omega_i)$ по локальному максимуму правдоподобия:

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}), \tag{14}$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta})\, \mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta})}, \tag{15}$$

$$\hat{\Sigma}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_i)(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_i)^t}{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)}, \tag{16}$$

где

$$\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\theta}_i)\hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\theta}_j)\hat{P}(\omega_j)} =$$

$$= \frac{|\hat{\Sigma}_i|^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_i)^t \hat{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_i)\right]\hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} |\hat{\Sigma}_j|^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_j)^t \hat{\Sigma}_j^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}_j)\right]\hat{P}(\omega_j)}. \tag{17}$$

Хотя обозначения внешне весьма усложняют эти уравнения, их интерпретация относительно проста. В экстремальном случае при $\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta})$, равном единице, если $\mathbf{x}_k$ принадлежит классу ω_i, и равном нулю в противном случае, оценка $\hat{P}(\omega_i)$ есть доля выборок из ω_i, оценка $\hat{\mu}_i$ — среднее этих выборок и $\hat{\Sigma}_i$ — соответствующая матрица ковариаций выборок. В более общем случае, когда $\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta})$ находится между нулем и единицей, все выборки играют некоторую роль в оценках. Однако и тогда оценки в основном — это отношения частот, средние выборок и матрицы ковариаций выборок.

Проблемы, связанные с решением этих неявных уравнений, сходны с проблемами, рассмотренными в п. 6.4.1. Дополнительная сложность состоит в необходимости избегать вырожденных решений. Из различных способов, которые можно применить для получения решения, самый простой состоит в том, чтобы, используя начальные оценки в (17), получить $\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)$ и затем, используя соотношения (14)—(16), обновить эти оценки. Если начальные оценки очень хорошие, полученные, возможно, из достаточно большого множества помеченных выборок, сходимость будет очень быстрой. Однако результат зависит от начальной точки, и всегда остается проблема неединственности решения. Более того, повторные вычисления и обращение матриц ковариаций может потребовать много времени.

Значительного упрощения можно достичь, если предположить, что матрицы ковариаций диагональны. Это дает возможность уменьшить число неизвестных параметров, что очень важно, когда число выборок невелико. Если это предположение слишком сильно, то еще возможно получить некоторое упрощение, предполагая, что c матриц ковариаций равны, что тоже снимает проблему вырожденных

решений. Вывод соответствующих уравнений для оценки по максимуму правдоподобия для этого случая рассматривается в задачах 5 и 6.

6.4.4. ПРОСТАЯ ПРИБЛИЖЕННАЯ ПРОЦЕДУРА

Из различных способов, которые используются для упрощения вычисления и ускорения сходимости, мы кратко рассмотрим один элементарный приближенный метод. Из соотношения (17) ясно, что вероятность $\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)$ велика, когда квадрат махалонобисова расстояния $(\mathbf{x}_k-\hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^t\,\hat{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}_k-\hat{\boldsymbol{\mu}}_i)$ мал. Предположим, что мы просто вычисляем квадрат евклидова расстояния $\|\mathbf{x}_k-\hat{\boldsymbol{\mu}}_i\|^2$ и находим среднее $\hat{\boldsymbol{\mu}}_m$, ближайшее к $\mathbf{x}_k$, и аппроксимируем $\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)$ как

$$\hat{P}(\omega_i|\mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i) \approx \begin{cases} 1 & \text{при } i=m, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Тогда итеративное применение формулы (15) приводит к следующей процедуре [1]) нахождения $\hat{\boldsymbol{\mu}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{\mu}}_c$:

Процедура: Базовые Изоданные

1. Выбираем некоторые начальные значения для средних $\hat{\boldsymbol{\mu}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{\mu}}_c$.

Цикл: 2. Классифицируем n выборок, разбивая их на классы по ближайшим средним.

3. Вновь вычисляем средние как средние значения выборок в своем классе.

4. Если какое-нибудь среднее изменило значение, переходим к Циклу; иначе останов.

Это типичные для некоторого класса процедуры, известные как процедуры *группировки* (кластер-процедуры). Позже мы поместим ее в класс итерационных оптимизационных процедур, поскольку средние имеют тенденцию изменяться так, чтобы минимизировать функцию критерия квадратичной ошибки. В настоящий момент мы рассматриваем это просто как приближенный способ получения оценки по максимуму правдоподобия для средних. Полученные значения можно принять за ответ или использовать как начальные точки для более точных вычислений.

---

[1]) В этой главе мы назовем и опишем различные итерационные процедуры как программы для ЭВМ. Все эти процедуры действительно были запрограммированы, часто с различными дополнительными элементами, такими, как разрешение неоднозначности, избежание состояний «ловушки» и обеспечения особых условий окончания работы. Таким образом, мы включили слово «базовые» в название, чтобы подчеркнуть, что наш интерес ограничивается только объяснением основных понятий.

Интересно посмотреть, как эта процедура ведет себя на примере данных из табл. 6.1. Рис. 6.4 показывает последовательность значений для $\hat{\mu}_1$ и $\hat{\mu}_2$, полученных для нескольких различных начальных точек. Так как взаимная замена $\hat{\mu}_1$ и $\hat{\mu}_2$ просто взаимозаменяет метки, присвоенные данным, траектория симметрична относительно линии $\hat{\mu}_1=\hat{\mu}_2$. Траектория приводит или к точке $\hat{\mu}_1=-2{,}176$,

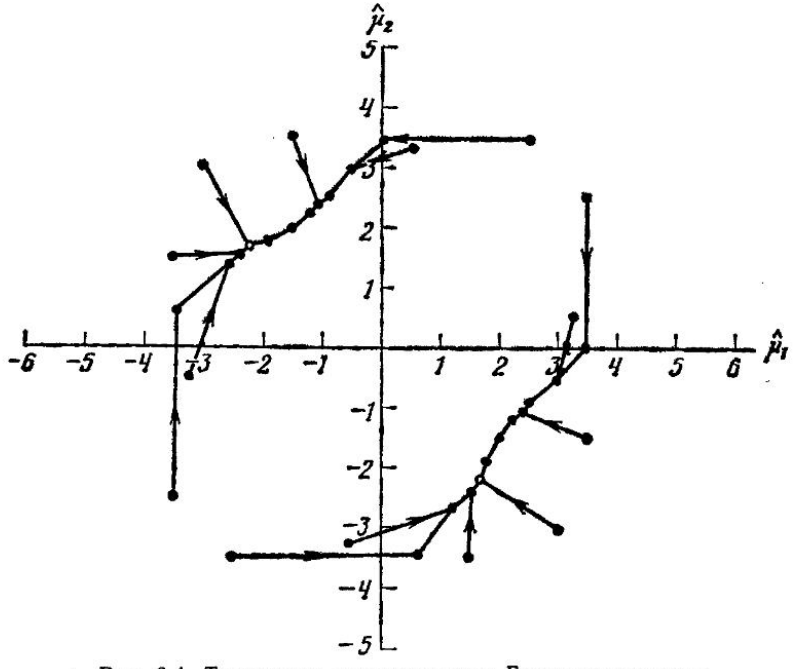


Рис. 6.4. Траектории для процедуры. Базовые изоданные.

$\hat{\mu}_2=1{,}684$, или к ее отображению. Это близко к решению, найденному методом максимума правдоподобия ($\hat{\mu}_1=-2{,}130$ и $\hat{\mu}_2=1{,}668$), и траектории в общем сходны с траекториями, показанными на рис. 6.3. В общем случае, когда пересечение между плотностями компонент мало, можно ожидать, что метод максимального правдоподобия и процедура Изоданные дадут похожие результаты.

6.5. БАЙЕСОВСКОЕ ОБУЧЕНИЕ БЕЗ УЧИТЕЛЯ

6.5.1. БАЙЕСОВСКИЙ КЛАССИФИКАТОР

Методы максимума правдоподобия не рассматривают вектор параметров θ как случайный — он просто неизвестный. Предварительное знание о возможных значениях θ необязательно, хотя на

практике такое знание можно использовать для выбора хорошей начальной точки при процедуре подъема на вершину. В этом разделе мы используем байесовский подход к обучению без учителя. Предположим, что θ — случайная величина с известным априорным распределением $p(\theta)$, и будем использовать выборки для вычисления апостериорной плотности $p(\theta|\mathcal{X})$. Весьма интересно, что такой анализ в основном будет подобен анализу байесовского обучения с учителем, что указывает на большое формальное сходство задач.

Начнем с четкого определения основных предположений. Предполагаем, что

1. Число классов известно.
2. Априорные вероятности $P(\omega_j)$ для каждого класса известны, $j=1, \ldots, c$.
3. Вид условных по классу плотностей $p(\mathbf{x}|\omega_j, \theta_j)$ известен, $j=1, \ldots, c$, но вектор параметров $\theta=(\theta_1, \ldots, \theta_c)$ неизвестен.
4. Часть знаний о θ заключена в известной априорной плотности $p(\theta)$.
5. Остальная часть знаний о θ содержится в множестве $\mathcal{X}$ из n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, извлеченных независимо из смеси с плотностью

$$p(\mathbf{x}|\theta) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \theta_j) P(\omega_j). \tag{1}$$

После этого мы могли бы непосредственно начать вычисление $p(\theta|\mathcal{X})$. Однако давайте сначала посмотрим, как эта плотность используется для определения байесовского классификатора. Предположим, что состояние природы выбирается с вероятностью $P(\omega_i)$ и вектор признаков $\mathbf{x}$ выбран в соответствии с вероятностным законом $p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i)$. Чтобы вывести байесовский классификатор, мы должны использовать всю имеющуюся информацию для вычисления апостериорной вероятности $P(\omega_i|\mathbf{x})$.

Покажем явно роль выборок, записав это в виде $P(\omega_i|\mathbf{x}, \mathcal{X})$. По правилу Байеса

$$P(\omega_i|\mathbf{x}, \mathcal{X}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}) P(\omega_i|\mathcal{X})}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \mathcal{X}) P(\omega_j|\mathcal{X})}.$$

Так как выбор состояния природы ω_i был сделан независимо от ранее полученных выборок: $P(\omega_i|\mathcal{X})=P(\omega_i)$, то мы получим

$$P(\omega_i|\mathbf{x}, \mathcal{X}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \mathcal{X}) P(\omega_j)}. \tag{18}$$

Введем вектор неизвестных параметров, написав

$$p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x}, \theta|\omega_i, \mathcal{X})\, d\theta = \int p(\mathbf{x}|\theta, \omega_i, \mathcal{X})\, p(\theta|\omega_i, \mathcal{X})\, d\theta.$$

Поскольку сам x не зависит от выборок, то $p(\mathbf{x}|\theta, \omega_i, \mathcal{X}) = p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i)$. Аналогично, так как знание состояния природы при выбранном x нам ничего не говорит о распределении θ, имеем $p(\theta|\omega_i, \mathcal{X}) = p(\theta|\mathcal{X})$.

Таким образом, получаем

$$p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}) = \int p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i)\, p(\theta|\mathcal{X})\, d\theta. \tag{19}$$

То есть наша наилучшая оценка для $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ получена усреднением $p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i)$ по θ_i. Хорошая это или плохая оценка, зависит от природы $p(\theta|\mathcal{X})$, и мы должны, наконец, заняться этой плотностью.

6.5.2. ОБУЧЕНИЕ ВЕКТОРУ ПАРАМЕТРОВ

Используя правило Байеса, можем написать

$$p(\theta|\mathcal{X}) = \frac{p(\mathcal{X}|\theta)\, p(\theta)}{\int p(\mathcal{X}|\theta)\, p(\theta)\, d\theta}, \tag{20}$$

где независимость выборок приводит к

$$p(\mathcal{X}|\theta) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k|\theta). \tag{21}$$

С другой стороны, обозначив через $\mathcal{X}^n$ множество n выборок, мы можем записать соотношение (20) в рекуррентной форме

$$p(\theta|\mathcal{X}^n) = \frac{p(\mathbf{x}_n|\theta)\, p(\theta|\mathcal{X}^{n-1})}{\int p(\mathbf{x}_n|\theta)\, p(\theta|\mathcal{X}^{n-1})\, d\theta}. \tag{22}$$

Это основные соотношения для байесовского обучения без учителя. Уравнение (20) подчеркивает связь между байесовским решением и решением по максимуму правдоподобия. Если $p(\theta)$ существенно равномерна в области, где имеется пик у $p(\mathcal{X}|\theta)$, то у $p(\theta|\mathcal{X})$ имеется пик в том же самом месте. Если имеется только один существенный пик при $\theta = \hat{\theta}$ и этот пик очень острый, то соотношения (19) и (18) дают

$$p(\mathbf{x}|\omega_i, \mathcal{X}) \approx p(\mathbf{x}|\omega_i, \hat{\theta}_i),$$

$$P(\omega_i|\mathbf{x}, \mathcal{X}) \approx \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i, \hat{\theta}_i)\, P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \hat{\theta}_j)\, P(\omega_j)}.$$

То есть эти условия оправдывают использование оценки по максимуму правдоподобия, используя ее в качестве истинного значения θ при создании байесовского классификатора.

Естественно, если плотность $p(\theta)$ была получена при обучении с учителем с использованием большого множества помеченных вы-

борок, она будет далека от равномерной и это решающим образом повлияет на $p(\theta|\mathcal{X}^n)$, когда n мало. Соотношение (22) показывает, как при наблюдении дополнительных непомеченных выборок изменяется наше мнение об истинном значении θ и особое значение приобретают идеи модернизации и обучения. Если плотность смеси $p(x|\theta)$ идентифицируема, то с каждой дополнительной выборкой $p(\theta|\mathcal{X}^n)$ становится все более острой, и при достаточно общих условиях можно показать, что $p(\theta|\mathcal{X}^n)$ сходится (по вероятности) к дельта-функции Дирака с центром в истинном значении θ. Таким образом, даже если мы не знаем класса выборок, идентифицируемость дает нам возможность узнать вектор неизвестных параметров θ и вместе с этим узнать плотности компонент $p(x|\omega_i, \theta)$.

Тогда это и есть формальное байесовское решение задачи обучения без учителя. В ретроспективе тот факт, что обучение без учителя параметрам плотности смеси тождественно обучению с учителем параметрам плотности компонент, не является удивительным. Действительно, если плотность компонент сама по себе является смесью, то тогда действительно не будет существенной разницы между этими двумя задачами.

Однако существуют значительные различия между обучениями с учителем и без учителя. Одно из главных различий касается вопроса идентифицируемости. При обучении с учителем отсутствие идентифицируемости просто означает, что вместо получения единственного вектора параметров мы получаем эквивалентный класс векторов параметров. Однако, поскольку все это приводит к той же плотности компонент, отсутствие идентифицируемости не представляет теоретических трудностей. При обучении без учителя отсутствие идентифицируемости представляет более серьезные трудности. Когда θ нельзя определить единственным образом, смесь нельзя разложить на ее истинные компоненты. Таким образом, в то время как $p(x|\mathcal{X}^n)$ может все еще сходиться к $p(x)$, величина $p(x|\omega_i, \mathcal{X}^n)$, описываемая выражением (19), в общем не сойдется к $p(x|\omega_i)$, т. е. существует теоретический барьер в обучении.

Другая серьезная проблема для обучения без учителя — это вычислительная сложность. При обучении с учителем возможность нахождения достаточной статистики дает возможность получить решения, которые решаются как аналитическими, так и численными методами. При обучении без учителя нельзя забывать, что выборки получены из плотности смеси

$$p(x|\theta) = \sum_{j=1}^{c} p(x|\omega_j, \theta_j) P(\omega_j), \tag{1}$$

и поэтому остается мало надежды найти простые точные решения для $p(\theta|\mathcal{X})$. Такие решения связаны с существованием простой достаточной статистики, и теорема факторизации требует возможности

представления $p(\mathcal{X}|\theta)$ следующим образом:

$$p(\mathcal{X}\,|\,\theta) = g(\mathrm{s}, \theta)\, h(\mathcal{X}).$$

Но по формулам (21) и (1) имеем

$$p(\mathcal{X}\,|\,\theta) = \prod_{k=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k\,|\,\omega_j, \theta_j)\, P(\omega_j)\right].$$

Таким образом, $p(\mathcal{X}|\theta)$ есть сумма c^n произведений плотностей компонент. Каждое слагаемое суммы можно интерпретировать как общую вероятность получения выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ с определенными метками, причем сумма охватывает все возможные способы пометки выборок. Ясно, что это приводит к общей смеси θ и всех $\mathbf{x}$, и нельзя ожидать простой факторизации. Исключением является случай, когда плотности компонент не перекрываются, так что, как только в θ изменяется один член, плотность смеси не равна нулю. В этом случае $p(\mathcal{X}|\theta)$ есть произведение n ненулевых членов и может обладать простой достаточной статистикой. Однако, поскольку здесь допускается возможность определения класса любой выборки, это сводит задачу к обучению с учителем и, таким образом, не является существенным исключением.

Другой способ сравнения обучения с учителем и без учителя состоит в подстановке плотности смеси $p(\mathbf{x}_n|\theta)$ в (22) и получении

$$p(\theta\,|\,\mathcal{X}^n) = \frac{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_n\,|\,\omega_j, \theta_j)\, P(\omega_j)}{\sum_{j=1}^{c}\int p(\mathbf{x}_n\,|\,\omega_j, \theta_j)\, P(\omega_j)\, p(\theta\,|\,\mathcal{X}^{n-1})\, d\theta}\, p(\theta\,|\,\mathcal{X}^{n-1}). \quad (23)$$

Если мы рассматриваем особый случай, где $P(\omega_1)=1$, а все остальные априорные вероятности равны нулю, соответствующий случаю обучения с учителем, в котором все выборки из класса 1, то формула (23) упрощается до

$$p(\theta\,|\,\mathcal{X}^n) = \frac{p(\mathbf{x}_n\,|\,\omega_1, \theta_1)}{\int p(\mathbf{x}_n\,|\,\omega_1, \theta_1)\, p(\theta\,|\,\mathcal{X}^{n-1})\, d\theta}\, p(\theta\,|\,\mathcal{X}^{n-1}). \quad (24)$$

Сравним уравнения (23) и (24), чтобы увидеть, как дополнительная выборка изменяет нашу оценку θ. В каждом случае мы можем пренебречь знаменателем, который не зависит от θ. Таким образом, единственное значительное различие состоит в том, что в случае обучения с учителем мы умножаем априорную плотность для θ на плотность компоненты $p(\mathbf{x}_n|\omega_1, \theta_1)$, в то время как в случае обучения без учителя мы умножаем на плотность смеси $\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_n|\omega_j, \theta_j)P(\omega_j)$. Предполагая, что выборка действительно принадлежит классу 1, мы видим, что незнание принадлежности какому-либо классу в случае обучения без учителя приводит к уменьшению влияния $\mathbf{x}_n$ на

изменение θ. Поскольку $\mathbf{x}_n$ может принадлежать любому из c классов, мы не можем использовать его с полной эффективностью для изменения компонент (компоненты) θ, связанных с каким-нибудь классом. Более того, это влияние мы должны распределить на различные классы в соответствии с вероятностью каждого класса.

6.5.3. ПРИМЕР

Рассмотрим одномерную двухкомпонентную смесь с $p(x|\omega_1) \sim N(\mu, 1)$, $p(x|\omega_2, \theta) \sim N(\theta, 1)$, где μ, $P(\omega_1)$ и $P(\omega_2)$ известны. Здесь

$$p(x|\theta) = \frac{P(\omega_1)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(x-\mu)^2\right] + \frac{P(\omega_2)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(x-\theta)^2\right].$$

Рассматриваемая как функция от x, эта плотность смеси представляет собой суперпозицию двух нормальных плотностей, причем одна имеет пик при $x=\mu$, а другая при $x=\theta$. Рассматриваемая как функция от θ, плотность $p(x|\theta)$ имеет один пик при $\theta=x$. Предположим, что априорная плотность $p(\theta)$ равномерна в интервале от a до b. Тогда после одного наблюдения

$$p(\theta|x_1) = \alpha p(x_1|\theta)\, p(\theta) = \begin{cases} \alpha' \left[P(\omega_1) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\mu)^2\right] + P(\omega_2) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\theta)^2\right]\right], \\ \qquad\qquad a \leqslant \theta \leqslant b, \\ 0 \qquad\qquad \text{в противном случае,} \end{cases}$$

где α и α' — нормирующие константы, независимые от θ. Если выборка x_1 находится в пределах $a \leqslant x_1 \leqslant b$, то $p(\theta|x_1)$ имеет пик при $\theta=x_1$. В противном случае она имеет пики либо при $\theta=a$, если $x_1<a$, либо при $\theta=b$, если $x_1>b$. Отметим, что прибавляемая константа $\exp[-(1/2)(x_1-\mu)^2]$ велика, если x_1 близок к μ. Это соответствует тому факту, что если x_1 близок к μ, то более вероятно, что он принадлежит компоненте $p(x|\omega_1)$, и, следовательно, его влияние на нашу оценку для θ уменьшается.

С добавлением второй выборки x_2 плотность $p(\theta|x_1)$ обращается в

$$p(\theta|x_1, x_2) = \beta p(x_2|\theta)\, p(\theta|x_1) = \begin{cases} \beta' \left[P(\omega_1) P(\omega_1) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\mu)^2 - \frac{1}{2}(x_2-\mu)^2\right] + \right. \\ \quad + P(\omega_1) P(\omega_2) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\mu)^2 - \frac{1}{2}(x_2-\theta)^2\right] + \\ \quad + P(\omega_2) P(\omega_1) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\theta)^2 - \frac{1}{2}(x_2-\mu)^2\right] + \\ \quad \left. + P(\omega_2) P(\omega_2) \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1-\theta)^2 - \frac{1}{2}(x_2-\theta)^2\right]\right], \\ \qquad\qquad \text{если } a \leqslant \theta \leqslant b, \\ 0 \qquad\qquad \text{в противном случае.} \end{cases}$$

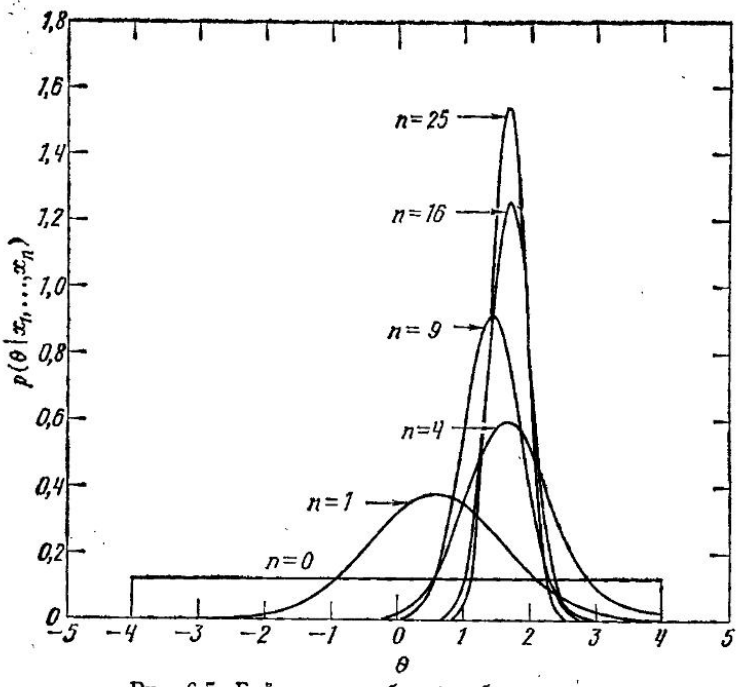


Рис. 6.5. Байесовское обучение без учителя.

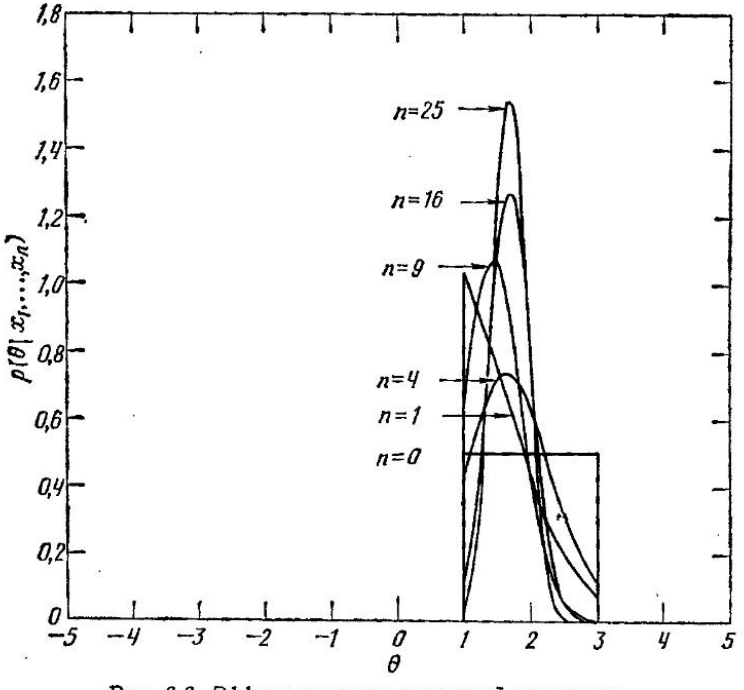


Рис. 6.6. Эффект сужения априорной плотности.

К сожалению, первое, что мы узнаем из этого выражения,— это то, что $p(\theta|\mathcal{X}^n)$ усложняется уже при $n=2$. Четыре члена суммы соответствуют четырем способам, которыми можно извлекать выборки из двухкомпонентных популяций. При n выборках будет 2^n членов, и нельзя найти простых достаточных статистик, чтобы облегчить понимание или упростить вычисления.

Возможно использование соотношения

$$p(\theta \mid \mathcal{X}^n) = \frac{p(x_n \mid \theta)\, p(\theta \mid \mathcal{X}^{n-1})}{\int p(x_n \mid \theta)\, p(\theta \mid \mathcal{X}^{n-1})\, d\theta}$$

и численного интегрирования для того, чтобы получить приближенное числовое решение $p(\theta|\mathcal{X}^n)$. Это было сделано для данных табл. 6.1 при значениях $\mu=2$, $P(\omega_1)=1/3$ и $P(\omega_2)=2/3$. Априорная плотность $p(\theta)$, равномерная на интервале от -4 до 4, включает данные этой таблицы. Эти данные были использованы для рекуррентного вычисления $p(\theta|\mathcal{X}^n)$. Полученные результаты представлены на рис. 6.5. Когда n стремится к бесконечности, мы с уверенностью можем ожидать, что $p(\theta|\mathcal{X}^n)$ будет стремиться к всплеску в точке $\theta=2$. График дает некоторое представление о скорости сходимости.

Одно из основных различий между байесовским и подходом по максимуму правдоподобия при обучении без учителя связано с априорной плотностью $p(\theta)$. Рис. 6.6 показывает, как изменяется $p(\theta|\mathcal{X}^n)$, когда предполагается, что $p(\theta)$ равномерна на интервале от 1 до 3, в зависимости от более четкого начального знания о θ. Результаты этого изменения больше всего проявляются, когда n мало. Именно здесь различия между байесовским подходом и подходом по максимуму правдоподобия наиболее значительны. При увеличении n важность априорного знания уменьшается, и в этом частном случае кривые для $n=25$ практически идентичны. В общем случае можно ожидать, что различие будет мало, когда число непомеченных выборок в несколько раз больше эффективного числа помеченных выборок, используемых для определения $p(\theta)$.

6.5.4. АППРОКСИМАЦИЯ НА ОСНОВЕ ПРИНЯТИЯ НАПРАВЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

Хотя задачу обучения без учителя можно поставить просто как задачу определения параметров плотности смеси, ни метод максимума правдоподобия, ни байесовский подход не дают простых аналитических результатов. Точные решения даже простейших нетривиальных примеров ведут к необходимости применения численных методов; объем вычислений при этом растет экспоненциально в зависимости от числа выборок. Задача обучения без учителя слишком важна, чтобы отбросить ее только из-за того, что точные решения

слишком трудно найти, и поэтому были предложены многочисленные процедуры получения приближенных решений.

Так как основное различие между обучением с учителем и без учителя состоит в наличии или отсутствии меток для выборок, очевидным подходом к обучению без учителя является использование априорной информации для построения классификатора и использования решений этого классификатора для пометки выборок. Такой подход называется подходом *принятия направленных решений* при обучении без учителя и составляет основу для различных вариаций. Его можно применять последовательно путем обновления классификатора каждый раз, когда классифицируется непомеченная выборка. С другой стороны, его можно применить при параллельной классификации, то есть подождать, пока все n выборок будут классифицированы, и затем обновить классификатор. При желании процесс можно повторять до тех пор, пока не будет больше изменений при пометке выборок [1]). Можно ввести различные эвристические процедуры, обеспечивающие зависимость любых коррекций от достоверности решения классификатора.

С подходом принятия направленных решений связаны некоторые очевидные опасности. Если начальный классификатор не достаточно хорош или если встретилась неудачная последовательность выборок, ошибки классификации непомеченных выборок могут привести к неправильному построению классификатора, что в свою очередь приведет к решению, очень приблизительно соответствующему одному из меньших максимумов функции правдоподобия. Даже если начальный классификатор оптимален, результат пометки не будет соответствовать истинной принадлежности классам; классификация исключит выборки из хвостов желаемого распределения и включит выборки из хвостов других распределений. Таким образом, если имеется существенное перекрытие между плотностями компонент, можно ожидать смещения оценок и неоптимальных результатов.

Несмотря на эти недостатки, простота процедур направленных решений делает байесовский подход доступным для численных методов, а решение с изъянами чаще лучше, чем отсутствие решения. При благоприятных условиях можно получить почти оптимальный результат при небольших вычислительных затратах. В литературе имеется несколько довольно сложных методов анализа специальных процедур направленных решений и сообщения о результатах экспериментов. Основной вывод состоит в том, что большинство этих процедур работает хорошо, если параметрические предположения правильны, если перекрытие между плотностями компонент невелико и если начальный классификатор составлен хотя бы приблизительно правильно.

[1]) Процедура «Базовые Изоданные», описанная в п. 6.4.4, в сущности является процедурой принятия решения этого типа.

6.6. ОПИСАНИЕ ДАННЫХ И ГРУППИРОВКА

Вернемся к нашей первоначальной задаче — обучению на множестве непомеченных выборок. С геометрической точки зрения эти выборки образуют облака точек в d-мерном пространстве. Предположим, что эти точки порождаются одномерным нормальным распределением. Тогда все, что мы можем узнать из этих данных, содержится в достаточных статистиках — в средней выборке и в матрице ковариаций выборок. В сущности, эти статистики составляют компактное описание данных. Средняя выборок обозначает центр тяжести облака. Его можно рассматривать как единственную точку x, которая лучше всего представляет все данные с точки зрения минимизации суммы квадратов расстояний от x до выборок. Матрица ковариаций выборок говорит о том, насколько хорошо средняя выборок описывает данные с точки зрения разброса данных в разных направлениях. Если точки действительно нормально распределены, то облако имеет простую гиперэллипсоидную форму, и средняя выборок обычно находится в области наибольшего сгущения точек.

Конечно, если данные не распределены нормально, эти статистики могут дать сильно искаженное описание данных. На рис. 6.7 показаны четыре различных множества данных, у которых одинаковые средние и матрицы ковариаций. Очевидно, статистики второго порядка не в состоянии отобразить структуру произвольного множества данных.

Предположив, что выборки отобраны из смеси c нормальных распределений, мы можем аппроксимировать большее разнообразие ситуаций. В сущности, это соответствует представлению, что выборки образуют гиперэллипсоидные облака различных размеров и ориентаций. Если число компонентных плотностей не ограничено, таким образом можно аппроксимировать практически любую функцию плотности и использовать параметры смеси для описания данных. К сожалению, мы видели, что задача определения параметров смеси не является тривиальной. Более того, в ситуациях, где a priori относительно мало известно о природе данных, предположение об особых параметрических формах может привести к плохим или бессмысленным результатам. Вместо нахождения структуры данных, мы бы навязали им свою структуру.

В качестве альтернативы можно использовать один из непараметрических методов, описанных в гл. 4, для оценки плотности неизвестной смеси. Если говорить точно, результирующая оценка в сущности является полным описанием того, что можно узнать из данных. Области большой локальной плотности, которые могут соответствовать существенным подклассам популяции, можно определить по максимумам оцененной плотности.

Если цель состоит в нахождении подклассов, более целесооб разны *процедуры группировки* (кластерного анализа). Грубо говоря, процедуры группировки дают описание данных в терминах кластеров, или групп точек данных, обладающих сильно схожими внутренними свойствами. Более формальные процедуры используют функции критериев, такие, как сумма квадратов расстояний от центров кластеров, и ищут группировку, которая приводит к экстремуму функции критерия. Поскольку даже это может привести к не-

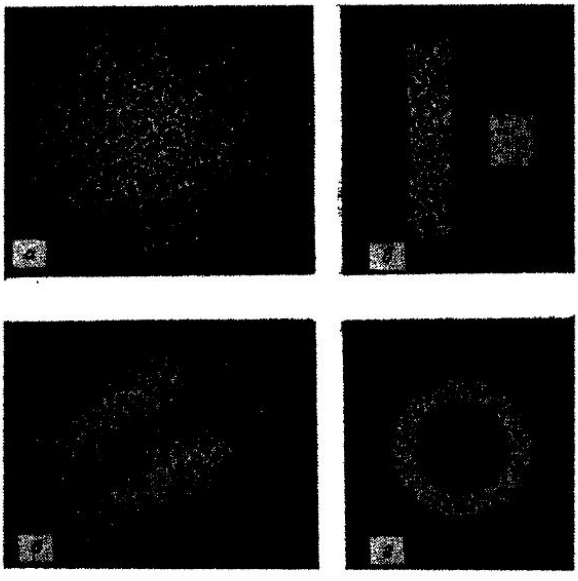


Рис. 6.7. Множества данных, имеющие одинаковые статистики второго порядка.

разрешимым вычислительным проблемам, были предложены другие процедуры, интуитивно многообещающие, но приводящие к решениям, не имеющим установленных свойств. Использование этих процедур обычно оправдывается простотой их применения и часто дает интересные результаты, которые могут помочь в применении более строгих процедур.

6.7. МЕРЫ ПОДОБИЯ

Так как процедура группировки описывается как процедура нахождения естественных группировок в множестве данных, мы вынуждены определить, что понимается под естественной группировкой. Что подразумевается под словами, что выборки в одно

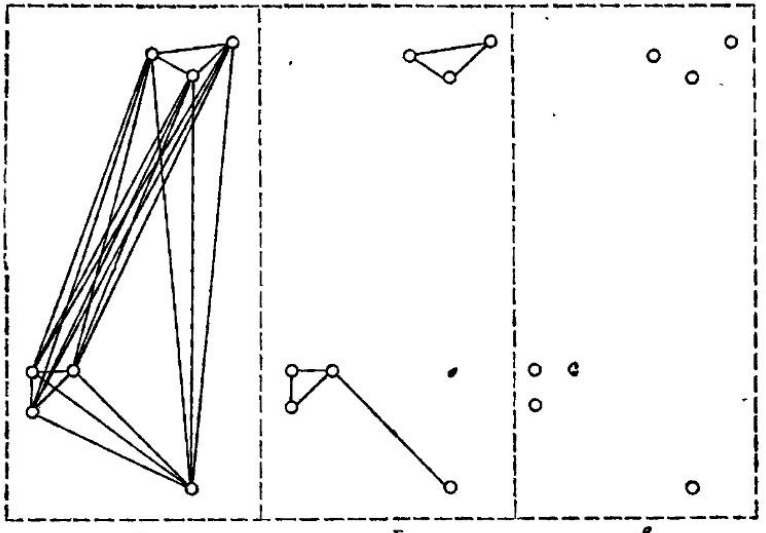
группе более схожи, чем выборки в другой? Этот вопрос в действительности содержит две отдельные части: как измерять сходство между выборками и как нужно оценивать разделение множества выборок на группы? В этом разделе рассмотрим первую из этих частей.

Наиболее очевидной мерой подобия (или различия) между двумя выборками является расстояние между ними. Один из путей, по которому можно начать исследование группировок, состоит в определении подходящей функции расстояния и вычислении матрицы расстояний между всеми парами выборок. Если расстояние является хорошей мерой различия, то можно ожидать, что расстояние между выборками в одной и той же группе будет значительно меньше, чем расстояние между выборками из разных групп.

Предположим на минуту, что две выборки принадлежат одной и той же группе, если евклидово расстояние между ними меньше, чем некоторое пороговое расстояние d_0. Сразу очевидно, что выбор d_0 очень важен. Если расстояние d_0 очень большое, все выборки будут собраны в одну группу. Если d_0 очень мало, каждая выборка образует отдельную группу. Для получения «естественных» групп расстояние d_0 должно быть больше, чем типичные внутригрупповые расстояния, и меньше, чем типичные межгрупповые расстояния (рис. 6.8).

Менее очевидным является факт, что результаты группировки зависят от выбора евклидова расстояния как меры различия. Этот выбор предполагает, что пространство признаков изотропно. Следовательно, группы, определенные евклидовым расстоянием, будут инвариаитны относительно сдвигов или вращений — движений точек данных, не меняющих их взаимного расположения. Однако они, вообще говоря, не будут инвариантны линейным или другим преобразованиям, которые искажают расстояния. Таким образом, как показано на рис. 6.9, простое масштабирование координатных осей может привести к различному разбиению данных на группы. Конечно, это не относится к задачам, в которых произвольное масштабирование является неестественным или бессмысленным преобразованием. Однако, если группы должны иметь какое-либо значение, они должны быть инвариантны преобразованиям, естественным для задачи.

Один из путей достижения инвариантности состоит в нормировании данных перед группировкой. Например, чтобы добиться инвариантности к сдвигу и изменению масштаба, нужно так перенести оси и выбрать такой масштаб, чтобы все признаки имели нулевое среднее значение и единичную дисперсию. Чтобы добиться инвариантности к вращению, нужно так повернуть оси, чтобы они совпали с собственными векторами матрицы ковариаций выборок. Это преобразование к *главным компонентам* может проводиться до масштабной нормировки или после нее.



6.8. Действие порога расстояния на группировку (линиями соединены точки с расстояниями, меньшими чем d_0).
а — большое d_0, *б* — среднее d_0, *в* — малое d_0.

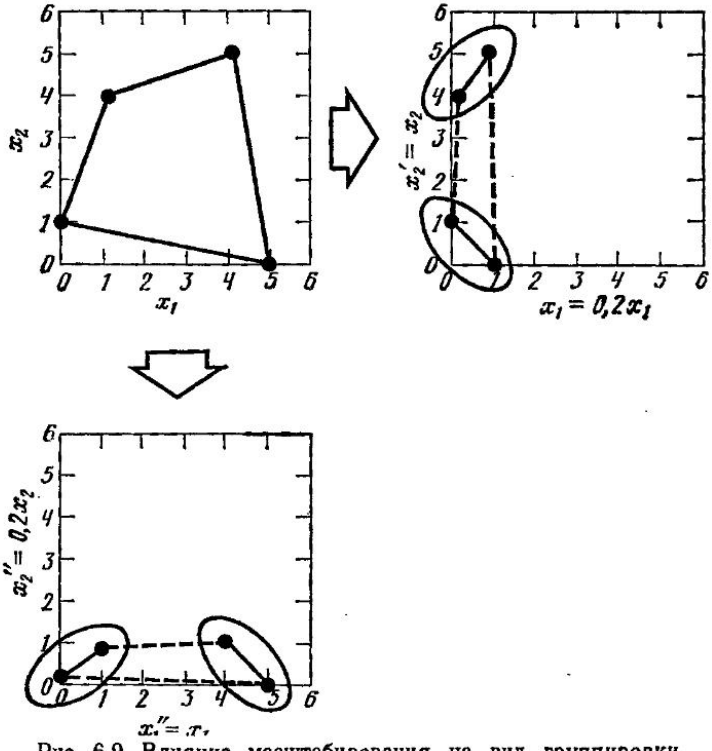
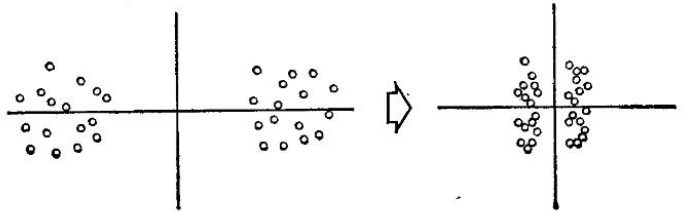


Рис. 6.9. Влияние масштабирования на вид группировки.

Однако читатель не должен делать вывода, что такого рода нормировка обязательно нужна. Рассмотрим, например, вопрос переноса и масштабирования осей так, чтобы каждый признак имел нулевое среднее значение и единичную дисперсию. Смысл такой нормировки состоит в том, что она предотвращает превосходство некоторых признаков при вычислении расстояний только потому, что они выражаются большими числовыми значениями. Вычитание среднего и деление на стандартное отклонение являются подходящей нормировкой, если разброс значений соответствует нормальной случайной дисперсии. Однако она может быть совсем неподходя-



а *б*

Рис. 6.10. Нежелательные эффекты нормирования.
а — ненормированные, *б* — нормированные.

щей, если разброс происходит благодаря наличию подклассов (рис. 6.10). Таким образом, такая обычная нормировка может быть совсем бесполезной в наиболее интересных случаях. В п. 6.8.3 описаны лучшие способы достижения инвариантности относительно масштабирования.

Вместо нормировки данных и использования евклидова расстояния можно применить некоторое нормированное расстояние, такое, как махаланобисово. В более общем случае мы можем вообще избавиться от использования расстояния и ввести неметрическую *функцию подобия* $s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ для сравнения двух векторов $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$. Обычно это симметрическая функция, причем ее значение велико, когда $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$ подобны. Например, когда угол между двумя векторами выбран в качестве меры их подобия, тогда нормированное произведение

$$s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{\|\mathbf{x}\|\,\|\mathbf{x}'\|}$$

может быть подходящей функцией подобия. Эта мера — косинус угла между $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$ — инвариантна относительно вращения и расширения, хотя она не инвариантна относительно сдвига и обычных линейных преобразований.

Когда признаки бинарны (0 или 1), функция подобия имеет простую негеометрическую интерпретацию в терминах меры обладания

общими признаками или же атрибутами. Будем говорить, что выборка $\mathbf{x}$ *обладает* i-м атрибутом, если $x_i = 1$. Тогда $\mathbf{x}^t\mathbf{x}'$ — это просто число атрибутов, которыми обладают $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$, и $\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{x}'\| = (\mathbf{x}^t\mathbf{x}\mathbf{x}'^t\mathbf{x}')^{1/2}$ есть среднее геометрическое числа атрибутов $\mathbf{x}$ и числа атрибутов $\mathbf{x}'$. Таким образом, $s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ — это мера относительного обладания общими атрибутами. Некоторые простые варианты этой формулы представляют

$$s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{d}$$

(доля общих атрибутов) и

$$s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{\mathbf{x}^t\mathbf{x} + \mathbf{x}'^t\mathbf{x}' - \mathbf{x}^t\mathbf{x}'}$$

(отношение числа общих атрибутов к числу атрибутов, принадлежащих $\mathbf{x}$ или $\mathbf{x}'$). Последняя мера (иногда называемая коэффициентом Танимото) часто встречается в области информационного поиска и биологической таксономии. В других приложениях встречаются самые разнообразные меры подобия.

Считаем нужным упомянуть, что фундаментальные понятия теории измерений необходимы при использовании любой функции подобия или расстояния. Вычисление подобия между двумя векторами всегда содержит в себе комбинацию значений их компонент. Однако в большинстве случаев применения распознавания образов компоненты вектора признаков являются результатом измерения очевидно несравнимых величин.

Каким образом, используя наш прежний пример о классификации пород древесины, можно сравнивать яркость с ровностью волокон? Должно ли сравнение зависеть от того, как измеряется яркость — в свечах на квадратный метр или в фут-ламбертах? Как нужно обрабатывать векторы, чьи компоненты содержат смесь из номинальных, порядковых, интервальных и относительных шкал?[1]) В конечном счете, нет методологического ответа на эти вопросы. Когда пользователь выбирает некоторую функцию подобия или нормирует свои данные каким-либо конкретным методом, он вводит информацию, которая задает процедуру. Мы приводили примеры альтернатив, которые могли бы оказаться полезными. Впрочем, мы можем только предупредить начинающего об этих подводных камнях в методах группировок.

6.8. ФУНКЦИИ КРИТЕРИЕВ ДЛЯ ГРУППИРОВКИ

Предположим, что мы имеем множество $\mathcal{X}$ из n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$, которые хотим разделить на точно c непересекающихся под-

[1]) Эти фундаментальные соображения относятся не только к группировкам. Они появляются, например, когда для неизвестной плотности вероятности выбрана параметрическая форма. В задачах группировки они проявляются более четко.

множеств $\mathcal{X}_1, \ldots, \mathcal{X}_c$. Каждое подмножество должно представлять группу, причем выборки из одной группы более подобны между собой, чем выборки из разных групп. Чтобы хорошо поставить задачу, единственный путь — это определить функцию критерия, которая измеряет качество группировки любой части данных. Тогда задача заключается в определении такого разделения, которое максимизирует функцию критерия. В этом разделе мы рассмотрим характеристики некоторых в основном подобных функций критериев, отложив временно вопрос о нахождении оптимального разделения.

6.8.1. КРИТЕРИЙ СУММЫ КВАДРАТОВ ОШИБОК

Самая простая и наиболее используемая функция критерия — это сумма квадратов ошибок. Пусть n_i — число выборок в $\mathcal{X}_i$, и пусть $\mathbf{m}_i$ — среднее этих выборок:

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}. \tag{25}$$

Тогда сумма квадратов ошибок определяется как

$$J_e = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \|^2. \tag{26}$$

Эта функция имеет простую интерпретацию. Для данной группы $\mathcal{X}_i$ средний вектор $\mathbf{m}_i$ лучше всего представляет выборки в $\mathcal{X}_i$, так как он минимизирует сумму квадратов длин векторов «ошибок» $\mathbf{x}-\mathbf{m}_i$. Таким образом, J_e измеряет общую квадратичную ошибку, вносимую при представлении n выборок $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ центрами c групп $\mathbf{m}_1, \ldots, \mathbf{m}_c$. Значение J_e зависит от того, как выборки сгруппированы в группы, и оптимальным разделением считается то, которое минимизирует J_e. Группировки такого типа называют разделением с *минимальной дисперсией*.

Какого типа задачи группировки подходят для критерия в виде суммы квадратов ошибок? В основном J_e — подходящий критерий в случае, когда выборки образуют облака, которые достаточно хорошо отделены друг от друга. Он хорошо будет работать для двух или трех групп рис. 6.11, но для данных на рис. 6.12 не даст удовлетворительных результатов [1]. Менее явные проблемы возникают,

[1]) Эти два множества данных хорошо известны по разным причинам. Рис. 6.11 показывает два из четырех измерений, сделанных Е. Андерсоном на 150 выборках трех видов ириса. Эти данные были использованы Р. А. Фишером в его классическом труде о дискриминантном анализе (Фишер, 1936) и с тех пор стали излюбленным примером для иллюстрации процедур группировки. Рис. 6.12 хорошо известен в астрономии как диаграмма Герцшпрунга — Рассела, которая привела к делению звезд на такие классы, как гиганты, сверхгиганты, звезды главной последовательности и белые карлики. Она была использована Форджи и затем Вишартом для иллюстрации ограничений в простых процедурах группировки.

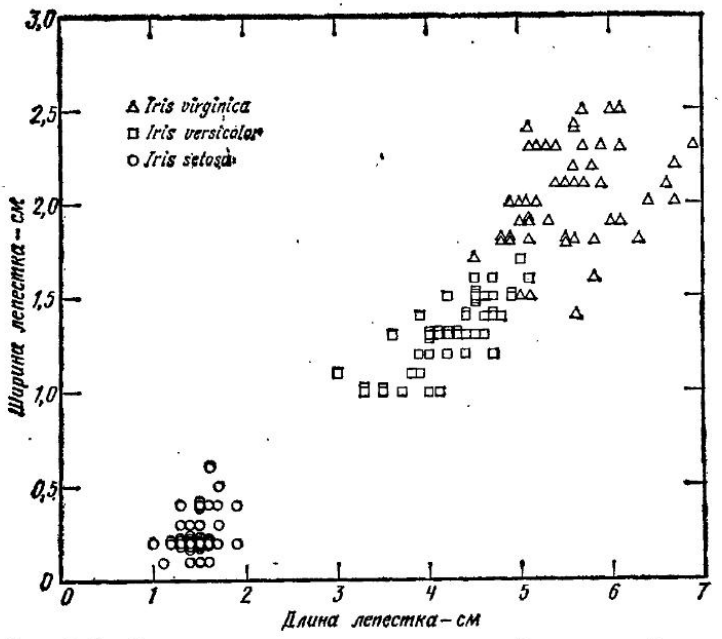


Рис. 6.11. Двумерное представление данных Андерсона об ирисах

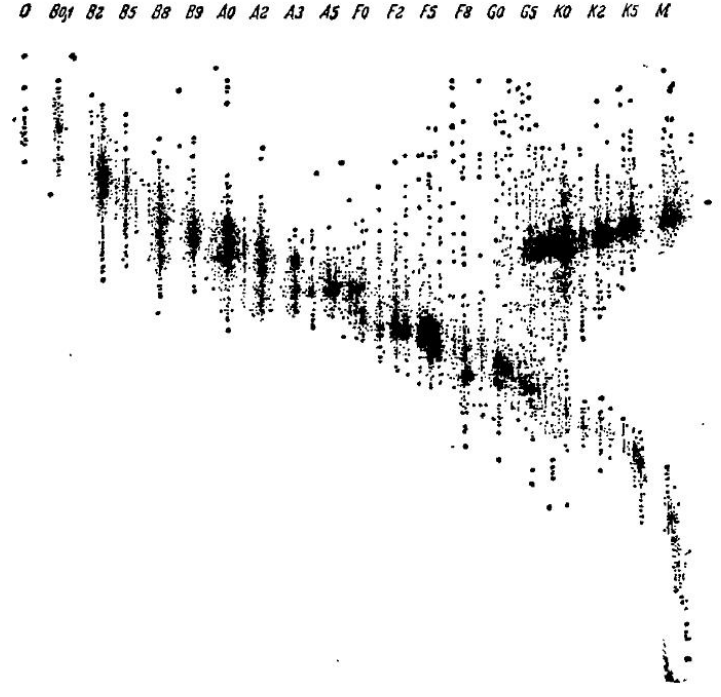


Рис. 6.12. Диаграмма Герцшпрунга — Рассела.

когда имеется большое различие между числом выборок из разных групп. В этом случае может случиться, что группировка, которая разделяет большую группу, имеет преимущество перед группировкой, сохраняющей единство группы, только потому, что достигнутое уменьшение квадратичной ошибки умножается на число членов этой суммы (рис. 6.13). Такая ситуация часто вызывается наличием случайных, далеко отстоящих выборок, и возникает проблема интерпретации и оценки результатов группировок. Так как об этом трудно что-либо сказать, мы просто отметим, что если дополнительные условия приводят к тому, что результат минимизации J_e неудовлетворителен, то эти условия должны быть использованы для формулировки лучшей функции критерия.

6.8.2. РОДСТВЕННЫЕ КРИТЕРИИ МИНИМУМА ДИСПЕРСИИ

Простыми алгебраическими преобразованиями мы можем избавиться от средних векторов в выражении J_e и получить эквивалентное выражение

$$J_e = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} n_i \bar{s}_i, \qquad (27)$$

где

$$\bar{s}_i = \frac{1}{n_i^2}\sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i}\sum_{\mathbf{x}'\in\mathcal{X}_i} \|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2. \qquad (28)$$

В уравнении (28) $\bar{s}_i$ интерпретируется как среднеквадратичное расстояние между точками i-й группы и подчеркивает тот факт, что критерий по сумме квадратов ошибок использует как меру подобия евклидово расстояние. Оно также подсказывает очевидный путь получения других функций критериев. Например, можно заменить $\bar{s}_i$ средним значением, медианой или, может быть, максимальным расстоянием между точками в группе. В более общем случае можно ввести соответствующую функцию подобия $s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ и заменить $\bar{s}_i$ такими

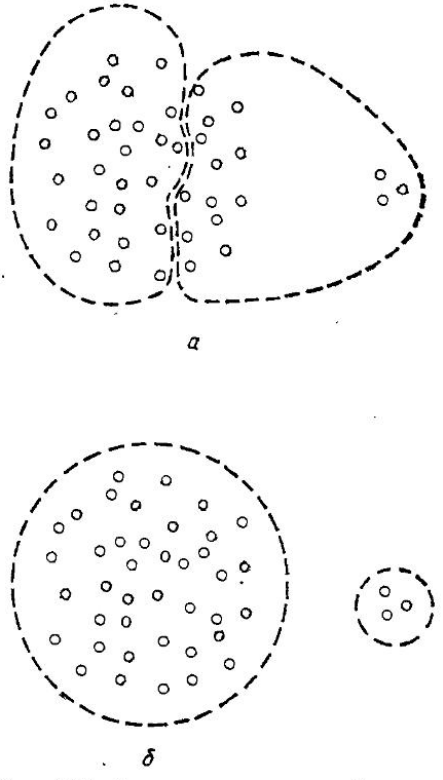


Рис. 6.13. Задача расщепления больших групп: сумма квадратов ошибок меньше для *а*, чем для *б*.

функциями, как

$$\bar{s}_i = \frac{1}{n_i^2} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \sum_{\mathbf{x}' \in \mathcal{X}_i} s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tag{29}$$

или

$$\bar{s}_i = \min_{\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}_i} s(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \tag{30}$$

Как и раньше, мы считаем оптимальным такое разделение, которое дает экстремум критерия. Это приводит к корректно поставленной задаче, и есть надежда, что ее решение вскроет внутреннюю структуру данных.

6.8.3. КРИТЕРИИ РАССЕЯНИЯ

6.8.3.1. *Матрицы рассеяния*

Другой интересный класс функций критериев можно получить из матриц рассеяния, используемых в множественном дискриминантном анализе. Следующие определения непосредственно вытекают из определений, данных в разд. 4.11.

Средний вектор i-й группы

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}. \tag{31}$$

Общий средний вектор

$$\mathbf{m} = \frac{1}{n} \sum_{\mathcal{X}} \mathbf{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{c} n_i \mathbf{m}_i. \tag{32}$$

Матрица рассеяния для i-й группы

$$S_i = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^t. \tag{33}$$

Матрица рассеяния внутри группы

$$S_W = \sum_{i=1}^{c} S_i. \tag{34}$$

Матрица рассеяния между группами

$$S_B = \sum_{i=1}^{c} n_i (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^t. \tag{35}$$

Общая матрица рассеяния

$$S_T = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} (\mathbf{x} - \mathbf{m})(\mathbf{x} - \mathbf{m})^t. \tag{36}$$

Как и раньше, из этих определений следует, что общая матрица рассеяния представляет собой сумму матрицы рассеяния внутри группы и матрицы рассеяния между группами:

$$S_T = S_W + S_B. \tag{37}$$

Отметим, что общая матрица рассеяния не зависит от того, как множество выборок разделено на группы. Она зависит только от общего множества выборок. Матрицы рассеяния, внутригрупповые и межгрупповые, все же зависят от разделения. Грубо говоря, существует взаимный обмен между этими двумя матрицами, при этом межгрупповое рассеяние увеличивается, если внутригрупповое уменьшается. Это удобно, потому что, минимизируя внутригрупповую матрицу, мы максимизируем межгрупповую.

Чтобы более точно говорить о степени внутригруппового и межгруппового рассеяния, нам нужно ввести скалярную меру матрицы рассеяния. Рассмотрим две меры — *след* и *определитель*. В случае одной переменной эти величины эквивалентны, и мы можем определить оптимальное разделение как такое, которое минимизирует S_W или максимизирует S_B. В случае многих переменных возникают сложности, и было предложено несколько критериев оптимальности.

6.8.3.2. *След в качестве критерия*

Самой простой скалярной мерой матрицы рассеяния является ее след — сумма ее диагональных элементов. Грубо говоря, след измеряет квадрат радиуса рассеяния, так как он пропорционален сумме дисперсий по направлениям координат. Таким образом, очевидной функцией критерия для минимизации является след S_W. В действительности это не что иное, как критерий в виде суммы квадратов ошибок, поскольку из (33) и (34) следует

$$\operatorname{tr} S_W = \sum_{i=1}^{c} \operatorname{tr} S_i = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \|^2 = J_e. \tag{38}$$

Так как $\operatorname{tr} S_T = \operatorname{tr} S_W + \operatorname{tr} S_B$ и $\operatorname{tr} S_T$ не зависит от разделения выборок, мы не получаем никаких новых результатов при попытке максимизировать $\operatorname{tr} S_B$. Однако нас должно утешать то, что при попытке минимизировать внутригрупповой критерий $J_e = \operatorname{tr} S_W$ мы максимизируем межгрупповой критерий

$$\operatorname{tr} S_B = \sum_{i=1}^{c} n_i \| \mathbf{m}_i - \mathbf{m} \|^2. \tag{39}$$

6.8.3.3. *Определитель в качестве критерия*

В разд. 4.11 мы использовали определитель матрицы рассеяния для получения скалярной меры рассеяния. Грубо говоря, он измеряет квадрат величины рассеяния, поскольку пропорционален произведению дисперсий в направлении главных осей. Так как S_B будет вырожденной матрицей, если число групп меньше или равно размерности, то $|S_B|$ — явно плохой выбор для функции критерия. Матрица S_W может быть вырожденной и непременно будет таковой в случае, если n—c меньше, чем размерность d [1]). Однако, если мы предполагаем, что S_W невырожденна, то приходим к функции критерия

$$J_d = |S_W| = \left| \sum_{i=1}^{c} S_i \right|. \tag{40}$$

Разделение, которое минимизирует J_d, обычно подобно разделению, которое минимизирует J_e, но они не обязательно одинаковы. Мы заметили ранее, что разделение, которое минимизирует квадратичную ошибку, может изменяться, если изменяется масштаб по осям. Этого не происходит с J_d. Чтобы выяснить, почему это так, рассмотрим невырожденную матрицу T и преобразование переменных $\mathbf{x}'=T\mathbf{x}$. Считая разделение постоянным, мы получаем новые средние векторы $\mathbf{m}_i'=T\mathbf{m}_i$ и новые матрицы рассеяния $S_i'=TS_iT^t$. Таким образом, J_d изменяется на

$$J_d' = |S_W'| = |TS_WT^t| = |T|^2 J_d.$$

Из того, что масштабный множитель $|T|^2$ одинаков для всех разделений, следует, что J_d и J_d' дают одно и то же разделение, и, значит, оптимальная группировка, основанная на J_d, инвариантна относительно линейных невырожденных преобразований данных.

6.8.3.4. *Инвариантные критерии*

Нетрудно показать, что собственные значения $\lambda_1, \ldots, \lambda_d$ матрицы $S_W^{-1}S_W$ инвариантны при невырожденных линейных преобразованиях данных. Действительно, эти собственные значения являются основными линейными инвариантами матриц рассеяния. Их числовые значения выражают отношение межгруппового рассеяния к внутригрупповому в направлении собственных векторов, и обычно

[1]) Это следует из того факта, что ранг S_i не может превышать n_i—1, и, таким образом, ранг S_W не может превышать $\Sigma\,(n_i-1)=n-c$. Конечно, если выборки ограничены только подпространством меньшей размерности, возможно получить в качестве S_W вырожденную матрицу, даже если $n-c \geqslant d$. В таких случаях нужно использовать какую-либо процедуру уменьшения размерности, прежде чем применять критерий на основе определителя (разд. 6.14).

желательно, чтобы разделение давало большие значения. Конечно, как мы отметили в разд. 4.11, тот факт, что ранг S_B не может превышать $c-1$, означает, что не более чем $c-1$ этих собственных значений будут не равны нулю. Тем не менее хорошими считаются такие разделения, у которых ненулевые собственные значения велики.

Можно изобрести большое число инвариантных критериев группировки с помощью компоновки соответствующих функций этих собственных значений. Некоторые из них естественно вытекают из стандартных матричных операций. Например, поскольку след матрицы — это сумма ее собственных значений, можно выбрать для максимизации функцию критерия [1])

$$\operatorname{tr} S_W^{-1} S_B = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i. \tag{41}$$

Используя соотношение $S_T = S_W + S_B$, можно вывести следующие инвариантные модификации для $\operatorname{tr} S_W$ и $|S_W|$:

$$\operatorname{tr} S_T^{-1} S_W = \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{1+\lambda_i}, \tag{42}$$

$$\frac{|S_W|}{|S_T|} = \prod_{i=1}^{d} \frac{1}{1+\lambda_i}. \tag{43}$$

Так как все эти функции критериев инвариантны относительно линейных преобразований, это же верно для разделений, которые приводят функцию к экстремуму. В частном случае двух групп только одно собственное значение не равно нулю, и все эти критерии приводят к одной и той же группировке. Однако, когда выборки разделены более чем на две группы, оптимальные разделения, хотя часто и подобные, необязательно одинаковы.

По отношению к функциям критерия, включающим S_T, отметим, что S_T не зависит от того, как выборки разделены на группы. Таким образом, группировки, которые минимизируют $|S_W|/|S_T|$, в точности те же, которые минимизируют $|S_W|$. Если мы вращаем и масштабируем оси так, что S_T становится единичной матрицей, можно видеть, что минимизация $\operatorname{tr} S_T^{-1} S_W$ эквивалентна мини-

[1]) Другой инвариантный критерий

$$|S_W^{-1} S_B| = \prod_{i=1}^{d} \lambda_i.$$

Однако, поскольку его значение обычно равно нулю, он мало полезен.

мизации критерия суммы квадратов ошибок $\mathrm{tr}\, S_W$ после этой нормировки. Рис. 6.14 иллюстрирует эффект такого преобразования. Ясно, что этот критерий страдает теми же недостатками, о которых мы предупреждали в разд. 6.7, и является, вероятно, наименее желательным критерием.

Сделаем последнее предупреждение об инвариантных критериях. Если можно получить очевидно различные группировки масштабированием осей или применением другого линейного преобразования, то все эти группировки должны быть выделены инвариантной процедурой. Таким образом, весьма вероятно, что инвариантные функции критериев обладают многочисленными локальными экстремумами и соответственно более трудно поддаются выделению экстремума.

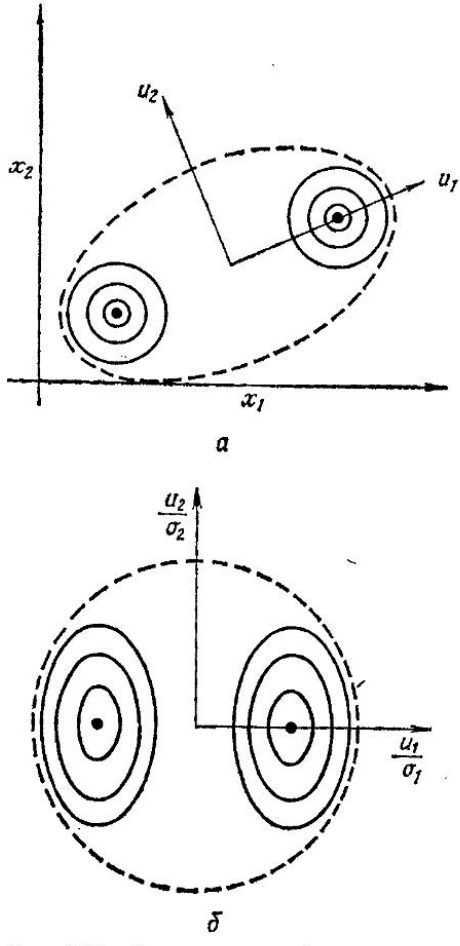


Рис. 6.14. Результат преобразования к нормированным главным компонентам (разделение, которое минимизирует $S_T^{-1}S_W$ в *а*, минимизирует сумму квадратичных ошибок в *б*).
а — ненормированные, *б* — нормированные.

Разнообразие функций критериев, о которых здесь говорилось, и небольшие различия между ними не должны заслонить их существенной общности. В каждом случае основой модели служит то, что выборки образуют *с* хорошо разделенных облаков точек. Матрица внутригруппового рассеяния S_W используется для измерения компактности этих точек, и основной целью является нахождение наиболее компактной группировки. Хотя этот подход оказался полезным во многих задачах, он не универсален. Например, он не выделит очень плотное облако, расположенное в центре редкого облака, или не разделит переплетенные вытянутые группы. Для таких случаев нужно создать другие критерии, которые больше подходят к структуре существующей или искомой.

6.9. ИТЕРАТИВНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

Когда найдена функция критерия, группировка становится корректно поставленной задачей дискретной оптимизации: найти такие разделения множества выборок, которые приводят к экстремуму функции критерия. Поскольку множество выборок конечно, существует конечное число возможных разделений. Следовательно, теоретически задача группировки всегда может быть решена трудоемким перебором. Однако на практике такой подход годится лишь для самых простых задач. Существует приблизительно $c^n/c!$ способов разделения множества из n элементов на c подмножеств [1]), и этот экспоненциальный рост при большом n просто давит. Например, скрупулезный поиск лучшего набора из пяти групп в случае 100 выборок потребует рассмотрения более чем 10^{67} разделений. Поэтому в большинстве применений перебор практически невозможен.

Наиболее часто используемым подходом для поиска оптимального разделения является итеративная оптимизация. Основная идея заключается в нахождении некоторого разумного начального разделения и в «передвижении» выборок из одной группы в другую, если это передвижение улучшает функцию критерия. Как и процедуры подъема на вершину к общем случае, такой подход гарантирует локальный, но не глобальный максимум. Различные начальные точки могут привести к разным решениям, и никогда не известно, было ли найдено лучшее решение. Несмотря на эти ограничения, вычислительные требования выполнимы, и такой подход приемлем.

Рассмотрим использование итеративного улучшения для минимизации критерия суммы квадратов ошибок J_e, записанного как

$$J_e = \sum_{i=1}^{c} J_i;$$

здесь

$$J_i = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \|^2,$$

где

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}.$$

[1]) Читателю, которому нравятся комбинаторные задачи, доставит удовольствие показать, что существует точно

$$\frac{1}{c!} \sum_{i=1}^{c} \binom{c}{i} (-1)^{c-i} i^n$$

разделений n элементов на c непустых подмножеств (Феллер В., Введение в теорию вероятностей и ее приложения, т. I, М., «Мнр», 1964). Если $n \gg c$, последний член наиболее существен.

Предположим, что выборка $\hat{\mathbf{x}}$, находящаяся в данный момент в группе $\mathcal{X}_i$, передвигается в группу $\mathcal{X}_j$. Тогда $\mathbf{m}_j$ изменяется на

$$\mathbf{m}_j^* = \mathbf{m}_j + \frac{\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j}{n_j + 1},$$

и J_j увеличивается на

$$\begin{aligned} J_j^* &= \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_j} \| \mathbf{x} - \mathbf{m}_j^* \|^2 + \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j^* \|^2 = \\ &= \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_j} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{m}_j - \frac{\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j}{n_j + 1} \right\|^2 + \left\| \frac{n_j}{n_j + 1} (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j) \right\|^2 = \\ &= J_{ij} + \frac{n_j}{n_j + 1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \|^2. \end{aligned}$$

Приняв предположение, что $n_i \neq 1$ (одиночных групп в разбиении не должно быть), такое же вычисление показывает, что $\mathbf{m}_i$ изменяется на

$$\mathbf{m}_i^* = \mathbf{m}_i - \frac{\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i}{n_i - 1}$$

и J_i уменьшается:

$$J_i^* = J_i - \frac{n_i}{n_i - 1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i \|^2.$$

Эти соотношения значительно упрощают вычисления изменения функции критерия. Переход $\hat{\mathbf{x}}$ из $\mathcal{X}_i$ в $\mathcal{X}_j$ положителен, если уменьшение J_i больше, чем увеличение J_j. Это случай, если

$$n_i/(n_i - 1) \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i \|^2 > n_j (n_j + 1) \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \|^2,$$

что обычно получается, когда $\hat{\mathbf{x}}$ ближе к $\mathbf{m}_j$, чем к $\mathbf{m}_i$. Если перераспределение выгодно, наибольшее уменьшение в сумме квадратов ошибок достигается выбором группы, для которой $n_j/(n_j+1)\|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j\|^2$ минимально. Это приводит к следующей процедуре группировки:

Процедура: Базовая Минимальная Квадратичная Ошибка

1. Выбрать первоначальное разделение выборок на группы и вычислить J_e и средние $\mathbf{m}_1, \ldots, \mathbf{m}_c$.

Цикл: 2. Выбрать следующую выборку — кандидата на передвижение $\hat{\mathbf{x}}$. Предполагается, что $\hat{\mathbf{x}}$ находится в $\mathcal{X}_i$.

3. Если $n_i = 1$, перейти к Следующий; иначе вычислить

$$\rho_j = \begin{cases} \dfrac{n_j}{n_j + 1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \|^2, & j \neq i; \\ \dfrac{n_i}{n_i - 1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i \|^2, & j = i. \end{cases}$$

4. Передвинуть $\hat{\mathbf{x}}$ в $\mathcal{X}_k$, если $\rho_k \leqslant \rho_j$ для всех j.
5. Вновь вычислить J_e, $\mathbf{m}_i$ и $\mathbf{m}_k$.

Следующий: 6. Если J_e не изменилось после n попыток, останов; иначе перейти к Цикл.

Если эту процедуру сравнить с процедурой Базовые Изоданные, описанной в п. 6.4.4, то ясно, что первая процедура в основном представляет собой последовательный вариант второй. Тогда как процедура Базовые Изоданные ждет, пока все n выборок будут перегруппированы перед обновлением значений, процедура Базовая Минимальная Квадратичная Ошибка обновляет значения после перегруппировки каждой выборки. Экспериментально было замечено, что эта процедура более чувствительна к локальным минимумам; другой ее недостаток состоит в том, что результаты зависят от порядка, в котором выбираются кандидаты. Однако это по крайней мере пошаговая оптимальная процедура, и ее легко модифицировать для применения к задачам, в которых выборки получаются последовательно, а группировка должна производиться в масштабе реального времени.

Общая проблема для всех процедур подъема на вершину — это выбор начальной точки. К сожалению, не существует простого универсального решения этой проблемы. Один из подходов — взять c произвольных выборок в качестве центров групп и использовать их для разделения данных на основе минимума расстояния. Повторения с различными случайными выборками в качестве центров могут дать некоторое представление о чувствительности решения к выбору начальной точки. Другой подход состоит в нахождении начальной точки для c-й группы из решения задачи с $(c-1)$ группами. Решение для задачи с одной группой — это среднее по всем выборкам; начальная точка для задачи с c группами может быть средняя для задачи с $(c-1)$ группами плюс выборка, которая находится дальше всех от ближайшего центра группы. Этот подход подводит нас к так называемым иерархическим процедурам группировок, которые простыми методами дают возможность получить очень хорошие начальные точки для итерационной оптимизации.

6.10. ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ГРУППИРОВКА

6.10.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим последовательность разделений n выборок на c групп. Первое из них — это разделение на n групп, причем каждая из групп содержит точно по одной выборке. Следующее разделение на $n-1$ групп, затем на $n-2$ и т. д. до n-го, в котором все выборки образуют одну группу. Будем говорить, что находимся на k-м уровне в последовательности, когда $c=n-k+1$. Таким образом, первый

уровень соответствует n группам, а n-й — одной группе. Если даны любые две выборки x и x′, на некотором уровне они будут собраны вместе в одну группу. Если последовательность обладает тем свойством, что, когда две выборки попадают в одну группу на уровне k, они остаются вместе на более высоких уровнях, то такая последовательность называется *иерархической группировкой*. Классические примеры иерархической группировки можно найти в биологии, где индивидуумы группируются в виды, виды — в роды, роды —

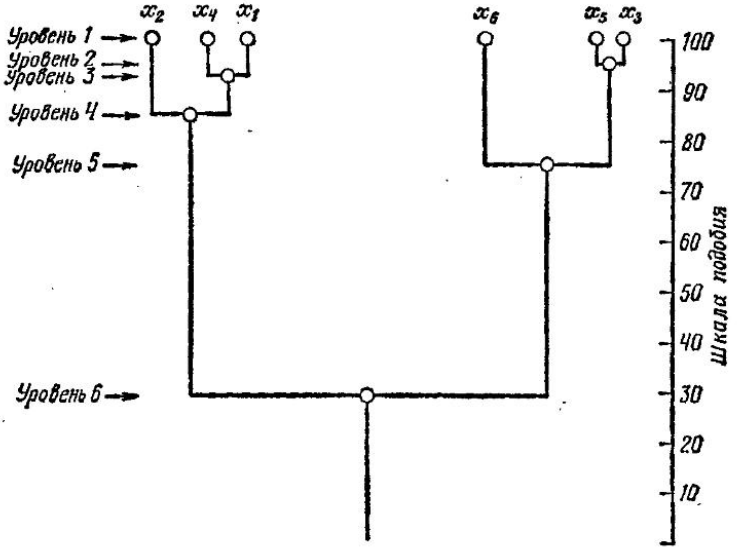


Рис. 6.15. Дендрограмма иерархической группировки.

в семейства и т. д. Вообще группировки такого рода проникают и в другие науки.

Для любой иерархической классификации существует соответствующее дерево, называемое *дендрограммой*, которое показывает, как группируются выборки. На рис. 6.15 представлена дендрограмма для гипотетической задачи, содержащей шесть выборок. Уровень 1 показывает шесть выборок как одиночные группы. На уровне 2 выборки x_3 и x_5 были сгруппированы в группу, и они остаются вместе на всех последующих уровнях. Если возможно измерить подобие между группами, то дендрограмма изображается в масштабе, чтобы показать подобие между группами, которые объединяются. На рис. 6.15, например, подобие между двумя группами выборок, которые объединены на уровне 6, имеет значение 30. Значения подобия часто используются для определения того, было ли объединение

естественным или вынужденным. Для нашего гипотетического примера можно сказать, что объединения на уровнях 4 и 5 естественны, но значительное уменьшение подобия, необходимое для перехода на уровень 6, делает объединение на этом уровне вынужденным. Мы вскоре увидим, как получить такие значения подобия.

Благодаря простоте понятий иерархические процедуры группировки находятся среди наиболее известных методов. Процедуры можно разделить на два различных класса: агломеративный и делимый. *Агломеративные* (процедуры снизу-вверх, объединяющие) процедуры начинают с c одиночных групп и образуют последовательность постепенно объединяемых групп. *Делимые* (сверху-вниз, разделяемые) процедуры начинают с одной группы, содержащей все выборки, и образуют последовательность постепенно расщепляемых групп. Вычисления, необходимые для перехода с одного уровня на другой, обычно проще для агломеративных процедур. Однако, когда имеется много выборок, а нас интересует только небольшое число групп, такое вычисление должно повториться много раз. Для простоты ограничимся агломеративными процедурами, отсылая читателя к литературе по делимым процедурам.

6.10.2. АГЛОМЕРАТИВНАЯ ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ГРУППИРОВКА

Основные шаги в агломеративной группировке содержатся в следующей процедуре:

Процедура: Базовая Агломеративная Группировка

1. Пусть $\hat{c}=n$ и $\mathscr{X}_i=\{\mathbf{x}_i\}$, $i=1, \ldots, n$.

Цикл: 2. Если $\hat{c}\leqslant c$, останов.

3. Найти ближайшую пару групп, скажем $\mathscr{X}_i$ и $\mathscr{X}_j$.
4. Объединить $\mathscr{X}_i$ и $\mathscr{X}_j$, уничтожить $\mathscr{X}_j$ и уменьшить $\hat{c}$ на единицу.
5. Перейти к Цикл.

Описанная процедура заканчивается, когда достигнуто заданное число групп. Однако, если мы продолжим до $c=1$, то можем получить дендрограмму, подобную изображенной на рис. 6.15. На любом уровне расстояние между ближайшими группами может дать значение различия на этом уровне. Читатель обратит внимание на то, что мы не сказали, как измерять расстояние между двумя группами. Рассуждения здесь очень схожи с рассуждениями при выборе функции критерия. Для простоты ограничимся следующими мерами расстояния, предоставляя другие возможные меры воображению

читателя:

$$d_{\min}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i,\ \mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|,$$

$$d_{\max}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \max_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i,\ \mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|,$$

$$d_{\text{avg}}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i} \sum_{\mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|,$$

$$d_{\text{mean}}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \|\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j\|.$$

Все эти меры напоминают минимальную дисперсию, и они обычно дают одинаковые результаты, если группы компактные и хорошо

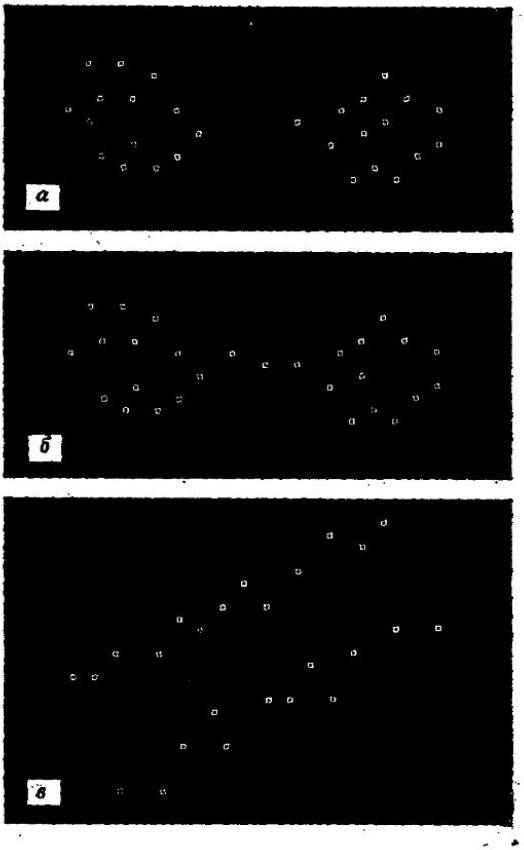


Рис. 6.16. Три примера.

разделены. Однако, если группы близки друг к другу или их форма в основном не гиперсферическая, могут получиться разные резуль-

таты. Мы используем двумерные множества точек, показанные на рис. 6.16, для иллюстрации этих различий.

6.10.2.1. *Алгоритм «ближайший сосед»*

Рассмотрим сначала случай, когда используется $d_{\min}$[1]). Предположим, что мы рассматриваем точки данных как вершины графа, причем ребра графа образуют путь между вершинами в том же подмножестве $\mathscr{X}$[2]). Когда для измерения расстояния между подмножествами используется $d_{\min}$, ближайшие соседи определяют ближайшие подмножества. Слияние $\mathscr{X}_i$ и $\mathscr{X}_j$ соответствует добавлению ребра между двумя ближайшими вершинами в $\mathscr{X}_i$ и $\mathscr{X}_j$. Поскольку ребра, соединяющие группы, всегда проходят между различными группами, результирующий граф никогда не имеет замкнутых контуров или цепей; пользуясь терминологией теории графов, можно сказать, что эта процедура генерирует *дерево*. Если так продолжать, пока все подмножества не будут соединены, в результате получим *покрывающее дерево* (остов) — дерево с путем от любой вершины к любой другой вершине. Более того, можно показать, что сумма длин ребер *результирующего дерева* не будет превышать суммы длин ребер для любого другого покрывающего дерева для данного множества выборок. Таким образом, используя $d_{\min}$ в качестве меры расстояния, агломеративная процедура группировки превращается в алгоритм для генерирования *минимального покрывающего дерева*.

Рис. 6.17 показывает результат применения этой процедуры к данным из рис. 6.16. Во всех случаях процедура заканчивалась при $c=2$. Минимальное покрывающее дерево можно получить, добавляя самое короткое ребро между двумя группами. В первом случае, где группы компактны и хорошо разделены, найдены явные группы. Во втором случае наличие некоторых точек, расположенных так, что между группами создан некоторый мост, приводит к довольно неожиданной группировке в одну большую продолговатую группу и в одну маленькую компактную группу. Такое поведение часто называют «цепным эффектом» и иногда относят к недостаткам этой меры расстояния. В случае, когда результаты очень чувствительны к шуму или к небольшим изменениям в положении точек данных, такая критика вполне законна. Однако, как иллюстрирует третий случай, та же тенденция формирования цепей может считаться преимуществом, если группы сами по себе вытянуты или имеют вытянутые отростки.

---

[1]) В литературе результирующую процедуру часто называют алгоритмом *ближайшего соседа* или алгоритмом *минимума*. Если алгоритм заканчивается, когда расстояние между ближайшими группами превышает произвольный порог, его называют алгоритмом *единичной связи*.

[2]) Хотя мы не будем широко использовать теорию графов, однако предполагается, что читатель в общих чертах знаком с этой теорией. Ясная, четкая трактовка дана в книге О. Оре, Графы и их применение, М., «Мир», 1965.

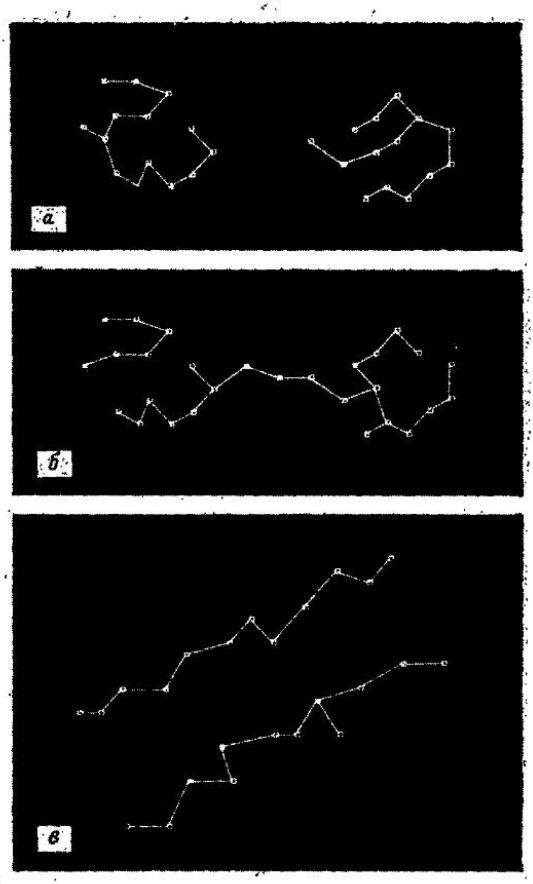


Рис. 6.17. Результаты алгоритма «ближайший сосед».

6.10.2.2. *Алгоритм «дальний сосед»*

Когда для измерения расстояния между группами используются d_{max}, возникновение вытянутых групп является нежелательным [1]). Применение процедуры можно рассматривать как получение графа, в котором ребра соединяют все вершины в группу. Пользуясь терминологией теории графов, можно сказать, что каждая группа образует *полный* подграф. Расстояние между двумя группами определяется наиболее удаленными вершинами в этих двух группах. Когда

[1]) В литературе результирующую процедуру часто называют алгоритмом *максимума* или *дальнего соседа*. Если он заканчивается, когда расстояние между двумя ближайшими группами превышает произвольный порог, его называют алгоритмом *полных связей*.

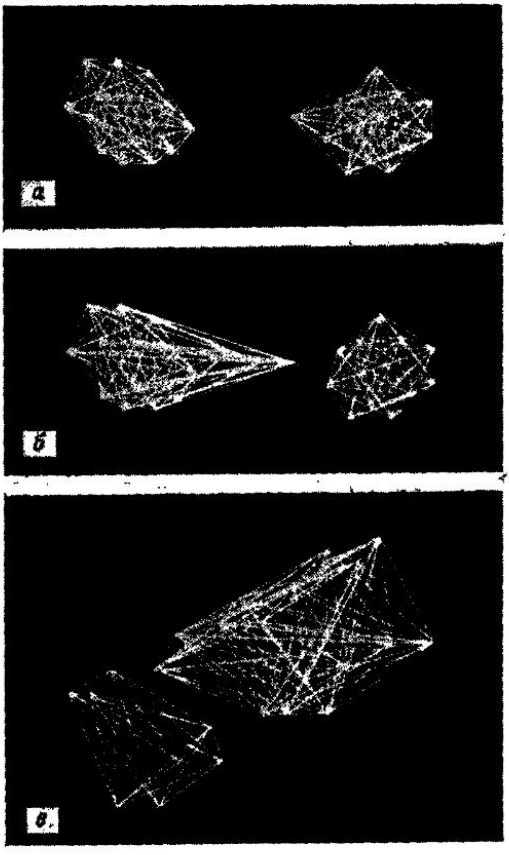


Рис. 6.18. Результаты алгоритма «дальний сосед».

ближайшие группы объединяются, граф измеияется добавлением ребер между каждой парой вершин в двух группах. Если мы определяем *диаметр* группы как наибольшее расстояние между точками в группе, то расстояние между двумя группами — просто диаметр их объединиения. Если мы определяем диаметр разделения как наибольший диаметр для группы в разделении, то каждая итерация увеличивает диаметр разделения минимально. Как видно из рис. 6.18, это является преимуществом, когда истинные группы компактны и примерно одинаковы по размерам. Однако в других случаях, как, например, в случае вытянутых групп, результирующая группировка бессмысленна. Это еще один пример наложения структуры на данные вместо нахождения их структуры.

6.10.2.3. *Компромиссы*

Минимальная и максимальная меры представляют два крайних подхода в измерении расстояния между группами. Как все процедуры, содержащие максимумы и минимумы, они оказываются слишком чувствительными к различным отклонениям. Использование усреднения — очевидный путь по возможности избежать этого, и d_{avg} и d_{mean} являются естественным компромиссом между $d_{\min}$ и $d_{\max}$. С вычислительной точки зрения d_{mean} — наиболее простая из всех мер, так как все другие требуют вычисления всех $n_i\, n_j$ пар расстояний $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$. Однако такую меру, как d_{avg}, можно использовать, когда расстояния $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$ заменены на меру подобия, а меру подобия между средними векторами трудно или невозможно определить. Мы оставляем читателю разобраться, как использование d_{avg} или d_{mean} может изменить группировку точек на рис. 6.16.

6.10.3. ПОШАГОВАЯ ОПТИМАЛЬНАЯ ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ГРУППИРОВКА

Мы заметили раньше, что, если группы растут за счет слияния ближайшей пары групп, результат напоминает минимальную дисперсию. Однако, когда мера расстояния между группами выбрана произвольно, редко можно утверждать, что результирующее разделение приводит к экстремуму какой-либо конкретной функции критерия. В действительности иерархическая группировка определяет группу как какой-то результат после применения процедуры группировки. Однако простая модификация позволяет получить пошаговую процедуру оптимизации для получения экстремума функции критерия. Это делается простой заменой шага 3 в элементарной агломеративной процедуре группировки (разд. 6.10.2) на

3′. Найти пару разделенных групп $\mathscr{X}_i$ и $\mathscr{X}_j$, слияние которых увеличит (или уменьшит) функцию критерия минимально.

Это гарантирует нам, что на каждой итерации мы сделали лучший шаг, даже если окончательное разделение не будет оптимальным.

Мы видели ранее, что использование $d_{\max}$ вызывает наименьшее возможное увеличение диаметра разделения на каждом шаге. Приведем еще один простой пример с функцией критерия суммы квадратичных ошибок J_e. С помощью анализа, очень сходного с использованным в разд. 6.9, мы находим, что пара групп, слияние которых увеличивает J_e на минимально возможную величину, это такая пара, для которой «расстояние»

$$d_e(\mathscr{X}_i, \mathscr{X}_j) = \sqrt{\frac{n_i n_j}{n_i + n_j}}\, \|\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j\|$$

минимально. Следовательно, при выборе групп для слияния этот критерий учитывает как число выборок в каждой группе, так и расстояние между группами. В общем случае использование d_e приведет к тенденции увеличения размера групп за счет присоединения одиночных или малых групп к большим, а не за счет слияния групп средних размеров. Хотя окончательное разделение может не минимизировать J_e, оно обычно дает хорошую начальную точку для дальнейшей итерационной оптимизации.

6.10.4. ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ГРУППИРОВКА И СООТВЕТСТВУЮЩАЯ МЕТРИКА

Предположим, что мы не имеем возможности снабдить метрикой наши данные, но что можем измерить *степень различия* $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ для каждой пары выборок, где $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geqslant 0$, причем равенство нулю выполняется тогда и только тогда, когда $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$. Тогда все еще можно использовать агломеративную процедуру, учитывая, что пара ближайших групп — это пара с наименьшими различиями. Интересно, что если мы определяем различия между двумя группами как

$$\delta_{\min}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i,\, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}_j} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$$

или

$$\delta_{\max}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i,\, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}_j} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'),$$

то иерархическая процедура группировки даст функцию расстояния для данного множества из n выборок. Более того, упорядочение расстояний между выборками будет инвариантно относительно любого монотонного преобразования величин различий.

Чтобы увидеть, как это происходит, начнем с определения *величины* v_k для группировки на уровне k. Для уровня 1 имеем $v_1 = 0$. Для всех более высоких уровней v_k равна минимальному различию между парами разных групп на уровне $(k-1)$.

При внимательном рассмотрении станет ясно, что как с $\delta_{\min}$, так и с $\delta_{\max}$ величина v_k либо остается такой же, либо увеличивается при увеличении k. Более того, мы предполагаем, что нет двух одинаковых выборок в множестве, так что $v_2 > 0$. Следовательно, $0 = v_1 < v_2 \leqslant v_3 \leqslant \ldots \leqslant v_n$.

Теперь можно определить *расстояние* $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ между $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$ как величину группировки на нижнем уровне, для которой $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$ находятся в одной группе. Чтобы убедиться, что это действительно функция расстояния, или *метрика*, мы должны показать следующее:

1) $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{x}'$,
2) $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = d(\mathbf{x}', \mathbf{x})$,
3) $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \leqslant d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + d(\mathbf{x}', \mathbf{x}'')$.

Легко видеть, что первое требование удовлетворяется. Самый низкий уровень, на котором x и x′ могут быть в одной группе, это уровень 1, так что $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')=v_1=0$.

Обратно, если $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')=0$, то из $v_2=0$ следует, что x и x′ должны быть в одной группе на уровне 1, и поэтому $\mathbf{x}=\mathbf{x}'$. Правильность второго требования немедленно следует из определения $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Остается третье требование — неравенство треугольника. Пусть $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')=v_i$ и $d(\mathbf{x}', \mathbf{x}'')=v_j$, так что x и x′ находятся в одной группе на уровне i, а x′ и x″ — в одной группе на уровне j. Из-за иерархического объединения групп одна из этих групп включает другую. Если $k=\max(i, j)$, ясно, что на уровне k x, x′ и x″ находятся в одной группе, и, следовательно, что

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\leqslant v_k.$$

Но так как значения v_k монотонно не уменьшаются, то $v_k=\max(v_i, v_j)$, и поэтому

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\leqslant \max(d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad d(\mathbf{x}', \mathbf{x}'')).$$

Это называется *ультраметрическим неравенством*. Оно даже сильнее, чем неравенство треугольника, так как $\max(d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), d(\mathbf{x}', \mathbf{x}''))\leqslant d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')+d(\mathbf{x}', \mathbf{x}'')$. Таким образом, удовлетворяются все условия, и мы получили подлинную метрику для сравнения n выборок.

6.11. МЕТОДЫ, ИСПОЛЬЗУЮЩИЕ ТЕОРИЮ ГРАФОВ

В двух или трех примерах мы использовали линейные графы, чтобы с иной точки зрения взглянуть на природу некоторых процедур группировки. Если формулы, использующие нормальные смеси и разделения на основе минимальной дисперсии, кажется, возвращают нас к изображению групп как изолированных скоплений точек, то язык и понятия теории графов дают возможность рассмотреть более скрытые структуры. К сожалению, немногое из таких возможностей изучалось систематически, и пока не существует единого подхода к постановке задач группировки как задач теории графов. Таким образом, эффективное использование этих идей — это пока еще во многом искусство, и читатель, желающий исследовать такие возможности, должен быть достаточно изобретателен.

Мы начнем наш краткий обзор методов теории графов, вернувшись к рассмотрению простой процедуры, которая строила графы, показанные на рис. 6.8. Здесь было выбрано пороговое расстояние d_0 и считалось, что две точки находятся в той же группе, если расстояние между ними меньше d_0. Эту процедуру легко обобщить для применения к произвольным мерам подобия. Предположим, что мы выбрали пороговое значение s_0, и будем говорить, что x подобен x′, если $s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')>s_0$. Это определяет *матрицу подобия* $S=[s_{ij}]$ размера

$n \times n$, где

$$s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) > s_0, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Эта матрица определяет *граф подобия*, в котором вершины соответствуют точкам и ребро соединяет вершины i и j тогда и только тогда, когда $s_{ij}=1$.

Группировка, полученная при помощи алгоритма единственной связи и модифицированного алгоритма полной связи, легко описы-

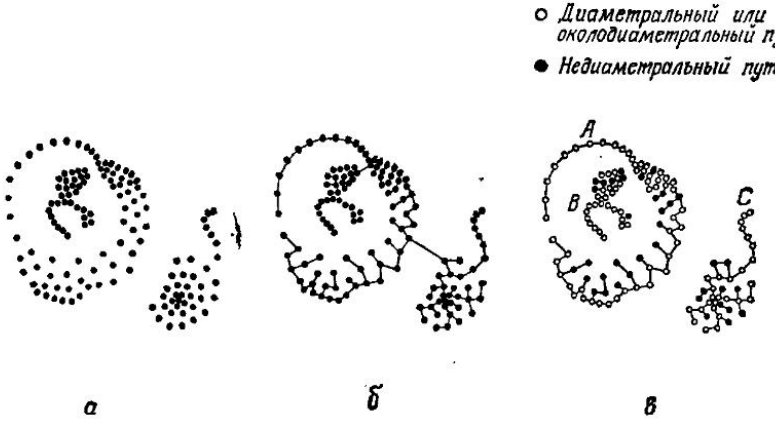


Рис. 6.19. Группы, образованные удалением несовместимых ребер (Цань, 1971). *а* — множество точек, *б* — минимальное покрывающее дерево, *в* — группы.

вается при помощи этого графа. В случае алгоритма единственной связи две выборки $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$ находятся в одной группе тогда и только тогда, когда существует цепь $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$, такая, что $\mathbf{x}$ подобен $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_1$ подобен $\mathbf{x}_2$ и т. д. для всей цепи. Следовательно, такая группировка соответствует *связанным компонентам* в графе подобия. В случае алгоритма полной связи все выборки в данной группе должны быть подобны друг другу, и ни одна выборка не должна находиться более чем в одной группе. Если мы опускаем второе требование, то тогда такая группировка соответствует *максимальным полным подграфам* в графе подобия, причем в «наибольших» подграфах ребра объединяют все пары вершин. (В общем случае группы, полученные с помощью алгоритма полной связи, можно найти среди максимальных полных подграфов, но их нельзя определить, не зная степени подобия.)

В предыдущем разделе мы заметили, что алгоритм ближайшего соседа можно рассматривать как алгоритм нахождения минимального покрывающего дерева. Обратно, при данном минимальном

покрывающем дереве можно найти группировки, полученные по алгоритму ближайшего соседа. Удаление самого длинного ребра вызывает разделение на две группы, удаление следующего по длине ребра — разделение на три группы и т. д. Это дает способ получения делимой иерархической процедуры и предлагает другие возможности деления графа на подграфы. Например, при выборе ребра — кандидата на удаление мы можем сравнить его длину с длинами других ребер, прилегающих к его вершинам. Назовем ребро *несовместимым*, если его длина l значительно больше $\bar{l}$ — средней длины всех других ребер, прилегающих к его вершинам. На рис. 6.19 показаны минимальное покрывающее дерево для двумерного множества точек и группы, полученные систематическим удалением всех ребер, чья длина l больше $2\bar{l}$. Отметим чувствительность этого критерия к локальным условиям, дающую результаты, которые значительно отличаются от простого удаления двух самых длинных ребер.

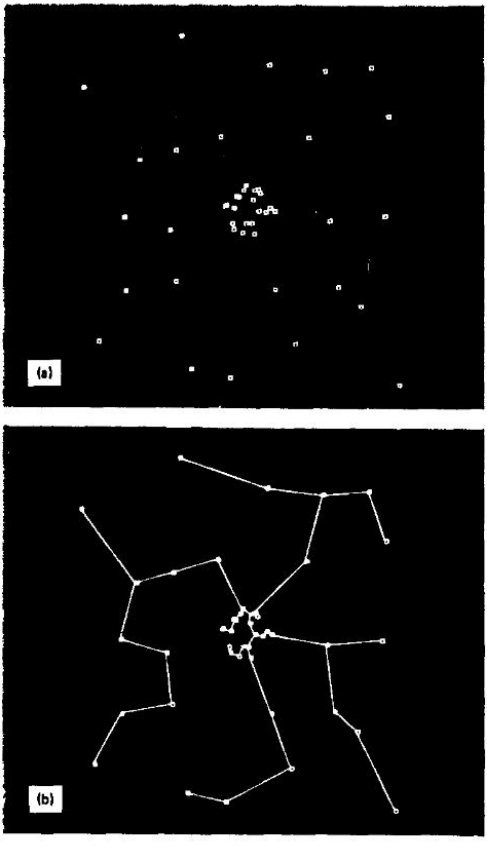


Рис. 6.20. Минимальное покрывающее дерево с бимодальным распределением длин ребер.

Когда точки данных располагаются в длинные цепочки, минимальное покрывающее дерево образует естественный скелет для цепочки. Если мы определим *диаметральный путь* как самый длинный путь по дереву, то тогда цепочка будет характеризоваться глубиной отклонения от диаметрального пути. Напротив, для большого, равномерно расположенного облака точек дерево не будет иметь явного диаметрального пути, а будет иметь несколько различных путей, близких к диаметральному. Для любого из них некоторое число вершин будет находиться вне пути. В то время как небольшие изменения в расположении точек данных могут вызвать

значительное перераспределение минимального покрывающего дерева, они обычно мало влияют на такие статистики.

Одной из полезных статистик, которую можно получить из минимального покрывающего дерева, является распределение длин ребер. На рис. 6.20 представлен случай, когда плотное облако располагается внутри редкого. Длины ребер минимального покрывающего дерева образуют две различные группы, которые легко обнаружить процедурой минимальной дисперсии. Убирая все ребра длиннее некоторого промежуточного значения, мы можем выделить плотное облако как наибольшую связанную компоненту оставшегося графа. Хотя более сложные конфигурации нельзя так легко изобразить, гибкость подхода, использующего теорию графов, позволяет его применить для широкого круга задач группировки.

6.12. ПРОБЛЕМА ОБОСНОВАННОСТИ

Почти для всех процедур, которые мы пока что рассмотрели, предполагалось, что число групп известно. Это разумное предположение, если мы обновляем классификатор, который был создан на малом множестве выборок, или если следим за образами, медленно меняющимися во времени. Однако это очень неестественное предположение в случае, когда мы исследуем совершенно неизвестное множество данных. Поэтому в кластерном анализе постоянно присутствует проблема: сколько групп имеется в множестве выборок?

Когда группировка производится достижением экстремума функции критерия, обычный подход состоит в том, что необходимо повторить процедуры группировки для $c=1$, $c=2$, $c=3$ и т. д. и проследить за изменением функции в зависимости от c. Например, ясно, что критерий по сумме квадратов ошибок J_e должен монотонно уменьшаться в зависимости от c, так как квадратичную ошибку можно уменьшать каждый раз, когда c увеличивается, за счет пересылки одной выборки в новую группу. Если n выборок разделены на $\hat{c}$ компактных, хорошо разделенных групп, можно ожидать, что J_e будет уменьшаться быстро до момента, когда $c=\hat{c}$, после этого уменьшение должно замедлиться, а при $c=n$ станет равным нулю. Подобные аргументы можно выдвинуть и для процедуры иерархической группировки, причем обычно предполагается, что большие различия в уровнях, на которых группы объединяются, указывают на наличие естественных группировок.

Более формальным подходом к задаче является попытка найти некоторую меру качества, которая показывает, насколько хорошо данное описание из c групп соответствует данным. Традиционными мерами качества являются хи-квадрат и статистики Колмогорова — Смирнова, но размерность данных обычно требует использования более простых мер, таких, как функция критерия $J(c)$. Так как мы предполагаем, что описание на основании $(c+1)$ групп будет точнее,

чем на основании c групп, то хотелось бы знать, что дает статистически значимое улучшение $J(c)$.

Формальным способом является выдвижение *нулевой гипотезы*, что имеются только c групп, и вычисление выборочного распределения для $J(c+1)$ этой гипотезы. Это распределение показывает, какого улучшения надо ожидать, когда описание из c групп является правильным. Процедура принятия решений должна принять нулевую гипотезу, если полученное значение $J(c+1)$ попадает внутрь пределов, соответствующих приемлемой вероятности ложного отказа.

К сожалению, обычно очень трудно сделать что-либо большее, кроме грубой оценки такого распределения для $J(c+1)$. Конечное решение не всегда достоверно, и статистическая задача проверки правильности группировки в основном не решена. Однако, предполагая, что даже некачественная проверка лучше, чем никакая, мы проведем следующий приблизительный анализ для простого критерия суммы квадратов ошибок. Предположим, что мы имеем множество $\mathcal{X}$ из n выборок и хотим решить, есть ли какое-либо основание для предположения, что они образуют более одной группы. Выдвинем нулевую гипотезу, что все n выборок получены из нормального распределения со средним $\boldsymbol{\mu}$ и матрицей ковариаций $\sigma^2 I$. Если эта гипотеза правильна, то любые обнаруженные группы были сформированы случайно, и любое замеченное уменьшение суммы квадратов ошибок, полученное при группировке, не имеет значения.

Сумма квадратов ошибок $J_e(1)$ — случайная переменная, так как она зависит от определенного множества выборок:

$$J_e(1) = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \| \mathbf{x} - \mathbf{m} \|^2,$$

где $\mathbf{m}$ — среднее всех n выборок. Согласно нулевой гипотезе, распределение для $J_e(1)$ приблизительно нормальное со средним $nd\sigma^2$ и дисперсией $2nd\sigma^4$.

Предположим теперь, что мы разделяем множество выборок на два подмножества $\mathcal{X}_1$ и $\mathcal{X}_2$ так, чтобы минимизировать $J_e(2)$, где

$$J_e(2) = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \|^2,$$

здесь $\mathbf{m}_i$ — среднее выборок в $\mathcal{X}_i$. Согласно нулевой гипотезе, такое разделение ложно, но тем не менее дает в результате значение $J_e(2)$, меньшее $J_e(1)$. Если бы мы знали выборочное распределение для $J_e(2)$, то могли бы определить, насколько мало должно быть $J_e(2)$, до того, как будем вынуждены отказаться от нулевой гипотезы одногруппового разделения. Так как аналитическое решение для оптимального разделения отсутствует, мы не можем вывести точного

решения для распределения выборок. Однако можно получить приблизительную оценку, получив проведением гиперплоскости через среднее выборок разделение, близкое к оптимальному. Для больших n можно показать, что сумма квадратов ошибок для такого разделения приблизительно нормальна со средним $n(d-2/\pi)\sigma^2$ и дисперсией $2n(d-8/\pi^2)\sigma^4$.

Результат совпадает с нашим предположением, что $J_e(2)$ меньше, чем $J_e(1)$, так как среднее $n(d-2/\pi)\sigma^2$ для $J_e(2)$ для близкого к оптимальному разделению меньше, чем среднее для $J_e(1) - nd\sigma^2$. Чтобы стать значимым, уменьшение суммы квадратов ошибок должно быть больше, чем этот результат. Мы можем получить приблизительное критическое значение для $J_e(2)$, предположив, что близкое к оптимальному разделение почти оптимально, используя нормальную аппроксимацию для распределения выборок и оценивая σ^2 как

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{nd} \sum_{\mathbf{x} \in \mathscr{X}} \| \mathbf{x} - \mathbf{m} \|^2 = \frac{1}{nd} J_e \ (1).$$

Конечный результат можно сформулировать следующим образом: отбрасываем нулевую гипотезу с p-процентным уровнем значимости, если

$$\frac{J_e(2)}{J_e(1)} < 1 - \frac{2}{nd} - \alpha \sqrt{\frac{2(1-8/\pi^2 d)}{nd}}, \tag{44}$$

где α определяется из выражения

$$p = 100 \int_{-\alpha}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-1/2u^2} du.$$

Таким образом, мы получим тест для решения, оправданно или нет разбиение группы. Ясно, что задачу с c группами можно решать, применив те же тесты для всех найденных групп.

6.13. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ В ПРОСТРАНСТВЕ МЕНЬШЕЙ РАЗМЕРНОСТИ И МНОГОМЕРНОЕ МАСШТАБИРОВАНИЕ

Сложность принятия решения, имеет ли смысл данное разделение, частично вытекает из-за невозможности визуального представления многомерных данных. Сложность усугубляется, когда применяются меры подобия или различия, в которых отсутствуют знакомые свойства расстояния. Одним из способов борьбы с этим является попытка представить точки данных как точки в некотором пространстве меньшей размерности так, чтобы расстояние между точками в пространстве меньшей размерности соответствовало различиям между точками в исходном пространстве. Если бы можно было найти достаточно точное представление в двух- или трехмерном

пространстве, это было бы очень важным способом для изучения внутренней структуры данных. Общий процесс нахождения конфигурации точек, в которой расстояние между точками соответствует различиям, часто называют *многомерным масштабированием*.

Начнем с более простого случая, когда имеет смысл говорить о расстояниях между n выборками $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n$. Пусть $\mathbf{y}_i$ — *отображение* $\mathbf{x}_i$ в пространство меньшей размерности, δ_{ij} — расстояние между $\mathbf{x}_i$ и $\mathbf{x}_j$, а d_{ij} — расстояние между $\mathbf{y}_i$ и $\mathbf{y}_j$. Тогда мы ищем *конфигурацию* точек отображения $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$, такую, для которой $n(n-1)/2$ расстояний d_{ij} между точками отображений по возможности близки соответствующим начальным расстояниям δ_{ij}. Так как обычно нельзя найти конфигурацию, для которой $d_{ij}=\delta_{ij}$ для всех i и j, нам необходим некоторый критерий для принятия решения, лучше ли одна конфигурация другой. Следующие функции сумм квадратов ошибок подходят в качестве кандидатов:

$$J_{ee}=\frac{1}{\sum\limits_{i<j}\delta_{ij}^2}\sum_{i<j}(d_{ij}-\delta_{ij})^2, \tag{45}$$

$$J_{ff}=\sum_{i<j}\left(\frac{d_{ij}-\delta_{ij}}{\delta_{ij}}\right)^2, \tag{46}$$

$$J_{ef}=\frac{1}{\sum\limits_{i<j}\delta_{ij}}\sum_{i<j}\frac{(d_{ij}-\delta_{ij})^2}{\delta_{ij}}. \tag{47}$$

Так как функции критериев содержат только расстояния между точками, они инвариантны к жесткому передвижению всей конфигурации. Более того, они все нормированы, так что их минимальные значения инвариантны относительно раздвижения точек выборок. Функция J_{ee} выявляет наибольшие ошибки независимо от того, большие или малые расстояния δ_{ij}. Функция J_{ff} выявляет наибольшие частные ошибки независимо от того, большие или малые ошибки $|d_{ij}-\delta_{ij}|$. Функция J_{ef} — полезный компромисс, выявляющий наибольшее произведение ошибки и частной ошибки.

Если функция критерия выбрана, оптимальной считается такая конфигурация $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$, которая минимизирует эту функцию критерия. Оптимальную конфигурацию можно искать с помощью стандартной процедуры градиентного спуска, начиная от некоторой начальной конфигурации и изменяя $\mathbf{y}_i$ в направлении наибольшего уменьшения функции критерия. Так как

$$d_{ij}=\|\mathbf{y}_i-\mathbf{y}_j\|,$$

градиент d_{ij} по отношению к $\mathbf{y}_i$ — это просто единичный вектор в направлении $\mathbf{y}_i-\mathbf{y}_j$. Таким образом, градиенты функции критерия

легко вычислить [1]):

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ee} = \frac{2}{\sum\limits_{i<j} \delta_{ij}^2} \sum_{j \neq k} (d_{kj} - \delta_{kj}) \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}},$$

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ff} = 2 \sum_{j \neq k} \frac{d_{kj} - \delta_{kj}}{\delta_{kj}^2} \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}},$$

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ef} = \frac{2}{\sum\limits_{i<j} \delta_{ij}} \sum_{j \neq k} \frac{d_{kj} - \delta_{kj}}{\delta_{kj}} \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}}.$$

Начальную конфигурацию можно выбрать случайным или любым другим способом, как-то распределяющим точки отображения. Если точки отображения лежат в $\hat{d}$-мерном пространстве, то можно найти простую и эффективную начальную конфигурацию путем выбора тех $\hat{d}$ координат выборок, у которых наибольшая дисперсия.

Следующий пример иллюстрирует результаты, которые можно получить этими методами [2]). Данные состоят из 30 точек, расположенных на единичных интервалах вдоль трехмерной спирали:

$$x_1(k) = \cos x_3,$$
$$x_2(k) = \sin x_3,$$
$$x_3(k) = k/\sqrt{2}, \quad k = 0, 1, \ldots, 29.$$

На рис. 6.21, *а* показано перспективное представление трехмерных данных. Когда был использован критерий J_{ef}, после двадцати итераций процедуры градиентного спуска была получена двумерная конфигурация, показанная на рис. 6.21, *б*. Конечно, сдвиги, вращения и отражения этой конфигурации были бы одинаково хорошими решениями.

В неметрических многомерных задачах масштабирования величины δ_{ij} представляют собой различия, чьи числовые значения не так важны, как их упорядочение. Идеальной была бы такая конфигурация, в которой упорядочение расстояний d_{ij} было бы одинаковым с упорядочением различий δ_{ij}. Упорядочим $m = n(n-1)/2$ различий так, что $\delta_{i_1 j_1} \leqslant \ldots \leqslant \delta_{i_m j_m}$, и пусть $\hat{d}_{ij}$ — *любые* m чисел, удовлетворяющие *ограничениям монотонности*:

$$\hat{d}_{i_1 j_1} \leqslant \hat{d}_{i_2 j_2} \leqslant \ldots \leqslant \hat{d}_{i_m j_m}.$$

---

[1]) Вторую частную производную также легко вычислить, так что можно использовать алгоритм Ньютона. Заметим, что при $\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_j$ единичный вектор от $\mathbf{y}_i$ до $\mathbf{y}_j$ не определен. Если возникает такая ситуация, то $(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)/d_{ij}$ может быть заменен любым единичным вектором.

[2]) Этот пример взят из статьи Саммона (J. W. Sammon, Jr.) «A nonlinear mapping for data structure analysis», *IEEE Trans. Comp.*, **C-18**, 401—409 (May 1969).

В общем случае расстояния d_{ij} не удовлетворяют этим ограничениям и числа $\hat{d}_{ij}$ не будут расстояниями. Однако степень, с которой d_{ij} удовлетворяет этим ограничениям, измеряется величиной

$$\hat{J}_{\text{mon}} = \min_{\hat{d}_{ij}} \sum_{i<j} (d_{ij} - \hat{d}_{ij})^2,$$

где всегда предполагается, что $\hat{d}_{ij}$ удовлетворяет ограничениям монотонности. Таким образом, $\hat{J}_{\text{mon}}$ — мера того, в какой степени

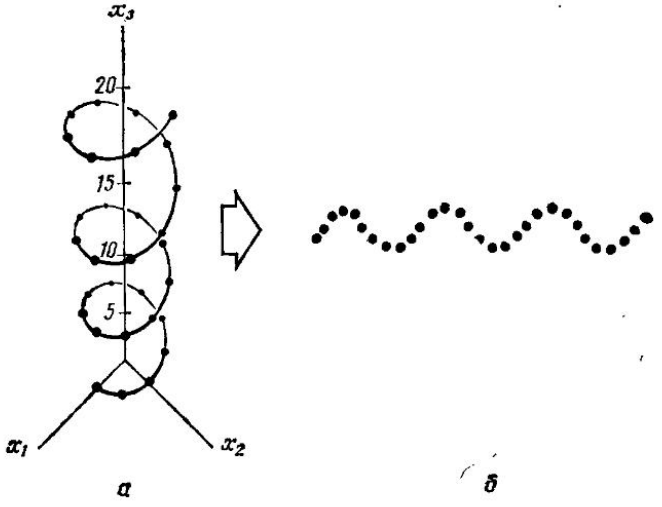


Рис. 6.21. Двумерное представление точек данных в трехмерном пространстве (Саммои, 1969).
а — спираль, *б* — точки отображения.

конфигурация точек $y_1, \ldots, y_n$ соответствует первоначальным данным. К сожалению, $\hat{J}_{\text{mon}}$ нельзя использовать для определения оптимальной конфигурации, так как это может свести конфигурацию к одной точке. Однако этот дефект легко устраняется следующей нормировкой:

$$J_{\text{mon}} = \frac{\hat{J}_{\text{mon}}}{\sum_{i<} d_i^2}. \tag{48}$$

Таким образом, J_{mon} инвариантно относительно сдвига, вращения и растяжения конфигурации, и оптимальной можно считать ту конфигурацию, которая минимизирует функцию критерия. Экспериментально было показано, что, когда число точек больше размерности пространства отображения, ограничения на монотонность являются очень сильными. Этого можно ожидать, поскольку число

ограничений растет пропорционально квадрату числа точек, что служит основанием для часто встречаемого утверждения о том, что данная процедура дает возможность получить метрическую информацию из неметрических данных. Качество представления обычно улучшается при увеличении размерности пространства отображения, и иногда необходимо выйти из трехмерного пространства, чтобы получить приемлемо малое значение J_{mon}. Однако это небольшая цена за возможность использования многих процедур группировок, имеющихся для точек данных в метрическом пространстве.

6.14. ГРУППИРОВКА И УМЕНЬШЕНИЕ РАЗМЕРНОСТИ

Так как большая размерность является камнем преткновения для многих процедур распознавания образов, были предложены многочисленные методы уменьшения размерности. В противоположность процедурам, которые мы только что рассматривали, большинство этих методов обеспечивает функциональное отображение, так что можно определить отображение произвольного вектора признаков. Классическими процедурами являются *анализ главных компонент* и *факторный анализ*, оба из которых уменьшают размерность путем формирования линейных комбинаций признаков [1]). Если мы рассматриваем задачу как задачу удаления или объединения (т. е. группирования) признаков с сильной корреляцией, то ясно, что методы группировки применимы к этой задаче. В терминах *матриц данных*, где n строк представляют d-мерные выборки, под обычной группировкой нужно понимать группировку строк — при этом для представления данных используется меньшее число центров групп, — в то время как под уменьшением размерности нужно понимать группировку столбцов — при этом для представления данных используются комбинированные признаки.

Рассмотрим простую модификацию иерархической группировки для уменьшения размерности. Вместо матрицы размера $n \times n$ расстояний между выборками мы рассмотрим *матрицу корреляций* $R=[\rho_{ij}]$ размера $d \times d$, где коэффициент корреляции ρ_{ij} относится к ковариациям (или ковариациям выборок) как

$$\rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}.$$

[1]) Целью анализа главных компонент (известного в литературе по теории связи как разложение Кархунена — Лоэва) является нахождение представления в пространстве меньшей размерности, учитывающего дисперсии признаков. Целью факторного анализа является нахождение представления в пространстве меньшей размерности, учитывающего корреляции между признаками. Для более глубокого ознакомления см. книги Kendall M. G., Stuart A. «The advanced theory of statistics», v. 3, ch. 43 (Hafner, New York, 1966) или Harman H. H. «Modern factor analysis» (University of Chicago Press, Chicago and London, 2nd ed., 1967).

Так как $0 \leqslant \rho_{ij}^2 \leqslant 1$, причем для некоррелированных признаков $\rho_{ij}^2 = 0$, а для полностью коррелированных признаков $\rho_{ij}^2 = 1$, то ρ_{ij}^2 играет роль функции подобия для признаков. Два признака, для которых ρ_{ij}^2 велико, хорошие кандидаты на объединение в один признак; таким образом, размерность снижается на единицу. Повторение этого процесса приводит к следующей иерархической процедуре:

Процедура: Иерархическое Уменьшение Размерности

1. Пусть $\hat{d} = d$ и $\mathcal{F}_i = \{x_i\}$, $i = 1, \ldots, d$.

Цикл: 2. Если $\hat{d} = d'$, останов.

3. Вычислить матрицу корреляций и найти наиболее коррелированную пару групп признаков, скажем $\mathcal{F}_i$ и $\mathcal{F}_j$.
4. Объединить $\mathcal{F}_i$ и $\mathcal{F}_j$, стереть $\mathcal{F}_j$ и уменьшить $\hat{d}$ на единицу.
5. Перейти к Цикл.

Вероятно, самым простым способом слияния двух групп признаков является их усреднение. (Это предполагает, что признаки были масштабированы так, что их числовые значения сравнимы.) Имея такое определение нового признака, несложно определить матрицу корреляции для групп признаков. Возможны различные модификации такого подхода, но мы их не будем рассматривать.

С точки зрения *классификации* образов из всех способов уменьшения размерности наибольшей критики заслуживает то, что все они связаны с достоверным *представлением* данных. Наибольшее внимание обычно уделяется тем признакам или группам признаков, которые обладают наибольшей изменчивостью. Но для классификации нам нужно *разделение*, а не представление. Грубо говоря, наиболее интересны те признаки, для которых разница между средними значениями классов велика по сравнению со стандартным отклонением, а не те, для которых велики стандартные отклонения. Короче говоря, нас интересует нечто подобное методу множественного дискриминантного анализа, описанному в гл. 4.

Растет количество теоретических работ по методам уменьшения размерности для классификации образов. Некоторые из этих методов стремятся сформировать новые признаки на основе линейных комбинаций старых. Другие из них стремятся создать меньшее подмножество первоначальных признаков. Основная проблема этой теории состоит в том, что деление распознавания образов на извлечение признаков, а затем классификацию теоретически является искусственным. Полностью оптимальный выделитель признаков не может быть чем бы то ни было иным, как оптимальным классификатором. Только тогда, когда накладываются ограничения на классификатор или на размер множества выборок, можно сформулировать нетривиальную (и очень сложную) задачу. В литературе можно найти различные способы преодоления этой проблемы при

некоторых обстоятельствах, и мы отметим несколько отправных точек для такой литературы. Обычно более продуктивен путь, когда знание области действия задачи позволяет получить более информативные признаки. В части II этой книги мы займемся систематическим изучением способов извлечения признаков из визуальных данных и более общей задачей анализа зрительных сцен.

6.15. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Литература по обучению без учителя и группировкам так обширна и рассеяна среди различных областей науки, что предлагаемый список можно рассматривать как случайную выборку. К счастью, некоторые из источников имеют обширную библиографию, что облегчает нашу задачу. Исторически дата первых источников восходит по меньшей мере к 1894 году, когда Карл Пирсон использовал выборки для определения параметров смеси двух нормальных плотностей одной переменной. Предполагая точное знание значений плотности смеси, Дёч (1936) использовал преобразование Фурье для разложения нормальных смесей. Меджисси (1961) распространил этот подход на другие классы смесей, в процессе решения поставив задачу идентифицируемости. Тэйчер (1961, 1963) и затем Якович и Спреджинс (1968) продемонстрировали идентифицируемость нескольких семейств смесей, причем последние авторы показали эквивалентность идентифицируемости и линейной независимости плотности компонент.

Фразы «обучение без учителя» или «самообучение» обычно относятся к определению параметров плотностей компонент по выборкам, извлеченным из смеси плотностей. Спреджинс (1966) и Купер (1969) дают ценный обзор этой области, а ее связь с последовательным байесовским обучением дана Ковером (1969). Некоторые из этих работ достаточно общие, в первую очередь касающиеся теоретических возможностей. Например, Стейнат (1968) показывает, как метод Дёча можно применить для изучения многомерных нормальных смесей и многомерных смесей Бернулли, а Якович (1970) демонстрирует возможность распознавания практически любой идентифицируемой смеси.

Удивительно мало работ касаются оценок по максимуму правдоподобия. Хесселблад (1966) вывел формулы максимума правдоподобия для оценки параметров нормальных смесей в случае одной переменной. Дей (1969) вывел формулы для случая многомерной матрицы равных ковариаций и указал на существование вырожденных решений с общими нормальными смесями. Наш подход к случаю многих переменных основан непосредственно на исключительно доступной статье Вольфа (1970), который также вывел формулы для многомерных смесей Бернулли. Формулировка байесовского подхода к обучению без учителя обычно приписывается Дэйли (1962);

более общие формулировки с тех пор были даны несколькими авторами (см. Хилборн и Лейниотис, 1968). Дэйли отметил экспоненциальный рост оптимальной системы и необходимость приближенных решений. Обзор Спреджинса дает ссылки на литературу по аппроксимациям на основе принятия решений, написанную до 1966 г., ссылки на последующие работы можно найти у Патрика, Костелло и Мондса (1970). Приближенные решения были получены с помощью гистограмм (Патрик и Хенкок, 1966), квантованных параметров (Фрелик, 1967) и рандомизированных решений (Агреула, 1970).

Мы не упомянули все способы, которые можно применить для оценки неизвестных параметров. В частности, мы не рассмотрели испытанных временем и надежных методов, использующих моменты выборок, в первую очередь из-за того, что ситуация становится довольно сложной, когда в смеси имеется больше двух компонент. Однако некоторые интересные решения для особых случаев были получены Дэвидом и Полем Куперами (1964) и усовершенствованы далее Полем Купером (1967). Из-за медленной сходимости мы не упомянули об использовании стохастической аппроксимации; заинтересованному читателю можно рекомендовать статью Янга и Коралуппи (1970).

Первоначально по группировке была проделана большая работа в биологических науках при изучении численной таксономии. Здесь основной интерес вызвала иерархическая группировка. Монография Сокаля и Снифа (1963) является отличным источником библиографии по этой литературе. Психологи и социологи также внесли вклад в группировку, хотя они обычно заинтересованы в группировке признаков, а не в группировке выборок (Трайон, 1939, и Трайон и Бейли, 1970). Появление вычислительных машин сделало кластерный анализ практической наукой и вызвало распространение литературы во многие области науки. Хорошо известная работа Болла (1965) дает исчерпывающий обзор этих работ и широко рекомендуется. Взгляды Болла имеют большое влияние на нашу разработку этой темы. Мы также воспользовались диссертацией Линга (1971), в которой приведен список трудов из 140 названий. Обзоры Большева (1961) и Дорофеюка (1971) дают обширную библиографию советской литературы по разбиению на группы.

Сокаль и Сниф (1963) и Болл (1965) приводят много используемых мер подобия и функций критериев. Стивенс (1968) осветил вопросы масштабов измерения, критериев инвариантности и необходимых статистических операций, а Ватанабе (1969) разработал фундаментальные философские проблемы, касающиеся группировки. Критика группировки Флешом и Зубином (1969) указывает на неприятные последствия небрежности в этих вопросах.

Джонс (1968) приписывает Торндайку (1953) первенство в использовании критерия по сумме квадратов ошибок, который часто появляется в литературе. Инвариантные критерии, о которых

мы говорили, были выведены Фридманом и Рубином (1967), указавшими, что эти критерии связаны со следовым критерием Хотеллинга и F-соотношением в классической статистике. Фукунага и Кунц (1970) показали, что эти критерии дают одинаковые оптимальные разделения в случае двух групп. Из критериев, которых мы не упоминали, критерий «сцепления» Ватанабе (1969, гл. 8) представляет особый интерес, так как он учитывает не только меру подобия между парами.

В тексте мы привели основные этапы ряда стандартных программ оптимизации и группировки. Эти описания были намеренно упрощены, так как даже более строгие и полные описания, имеющиеся в литературе, не всегда упоминают о разрешении неоднозначностей или об исключении случайных «всплесков». Алгоритм Изоданные Болла и Холла (1967) отличается от нашего упрощенного описания в основном расщеплением групп, имеющих слишком большую изменчивость внутри группы, и слиянием групп, которые имеют слишком малую изменчивость между группами. Наше описание элементарной процедуры минимальных квадратичных ошибок получено на основе неопубликованной программы для ЭВМ, написанной Р. Синглтоном и У. Каутцом в Станфордском исследовательском институте в 1965 г. Эта процедура тесно связана с адаптивной последовательной процедурой Себестьяна (1962) и так называемой процедурой k-средних, свойства сходимости которой изучались Маккуином (1967). Интересные применения этой процедуры к распознаванию символов описаны Эндрюсом, Атрубином и Ху (1968) и Кейзи и Надь (1968).

Сокаль и Сниф (1963) приводят список ранних работ по иерархическому группированию, и Вишарт (1969) дает обширную библиографию источников по процедурам единственной связи, ближайшего соседа, полных связей, дальнего соседа, минимальной квадратичной ошибки и других. Ланс и Вильямс (1967) показывают, как можно получить большинство из этих процедур путем уточнения различными способами общей функции расстояния; кроме этого, они дают библиографию основных работ по делимым иерархическим группировкам. Связь между процедурами единственной связи и минимальным покрывающим деревом была показана Говером и Россом (1969), которые рекомендовали простой, эффективный алгоритм для нахождения минимального покрывающего дерева, предложенного Примом (1957). Эквивалентность между иерархической группировкой и функцией расстояния, удовлетворяющей ультраметрическому неравенству, показана Джонсоном (1967).

Большинство статей о группировках явно или неявно принимает критерий минимальной дисперсии. Вишарт (1969) указал на серьезные ограничения, присущие этому подходу, и в качестве альтернативы предложил процедуру, напоминающую оценку методом k_n ближайших соседей моды плотности смеси. Методы минимальной

дисперсии подвергались критике также со стороны Лина (1971) и Цаня (1971), причем оба они предлагали для группировки использовать теорию графов. Работа Цаня, хотя и предназначенная для данных любой размерности, была мотивирована желанием найти математическую процедуру, которая группирует множество данных в двух измерениях наиболее естественно для глаза. (Хэрэлик и Келли (1969) и Хэрэлик и Динштейн (1971) также рассматривают операции обработки изображений как процедуры группировок. Эта точка зрения применима ко многим процедурам, описанным в части II этой книги.)

Большинство ранних работ по методам теории графов было сделано для целей информационного поиска. Августсон и Минкер (1970) считают, что впервые теорию графов к группировке применил Кунс (1959). Они же дают экспериментальное сравнение некоторых методов теории графов, предназначенных для целей информационного поиска, и обширную библиографию работ в этой области. Интересно, что среди статей с ориентацией на теорию графов мы находим три, рассматривающие статистические тесты для оценки значимости групп,— это статьи Боннера (1964), Хартигана (1967) и Лина (1971). Холл, Теппинг и Болл (1971) вычислили, как сумма квадратов ошибок изменяется в зависимости от размерности данных и предполагаемого числа групп для однородных данных, и предложили эти распределения в качестве полезного стандарта для сравнения. Вольф (1970) предлагает тест для оценки значимости групп, основанный на предполагаемом распределении хи-квадрат для логарифмической функции правдоподобия.

Грин и Кармон (1970), чья ценная монография о многомерном масштабировании содержит обширную библиографию, прослеживают происхождение многомерного масштабирования до статьи Ричардсона (1938). Недавно возникший интерес к этой теме был стимулирован двумя разработками — неметрическим многомерным масштабированием и применением графических устройств ЭВМ. Неметрический подход, разработанный Шепардом (1962) и развитый Крускалом (1964а), хорошо подходит для многих задач психологии и социологии. Вычислительные аспекты минимизации критерия J_{mon} при ограничениях на монотонность детально описаны Крускалом (1964б). Колверт (1968) использует модификацию критерия Шепарда для обеспечения двумерного отображения на ЭВМ многомерных данных. Более простой для вычислений критерий J_{ef} был предложен и использован Саммоном (1969) для отображения данных при диалоговом режиме анализа.

Интерес к человеко-машинным системам возник частично из-за трудностей определения функций критериев и процедур группировок, которые приводят к желаемым результатам.

Матсон и Дамман (1965) одни из первых предложили человеко-машинное решение этой задачи. Широкие возможности диалоговых

систем хорошо описаны Боллом и Холлом (1970) в статье о системе PROMENADE. Другие хорошо известные системы — BC TRY (Трайон и Бейли, 1966, 1970), SARF (Стэнли, Лендэрис и Найноу, 1967), INTERSPACE (Патрик, 1969) и OLPARS (Саммон, 1970).

Ни автоматические, ни человеко-машинные системы для распознавания образов не могут избежать проблем, связанных с большой размерностью данных. Были предложены различные процедуры уменьшения размерности путем либо отбора наилучшего подмножества имеющихся признаков, либо получения комбинаций признаков (обычно линейных). Для избежания серьезных вычислительных проблем большинство из этих процедур использует некоторый критерий, отличный от критерия вероятности ошибки при выборе. Например, Миллер (1962) использовал критерий $\mathrm{tr}\, S_W^{-1} S_B$, Льюис (1962) — критерий энтропии, а Мерилл и Грин (1963) использовали критерий дивергенции. В некоторых случаях можно ограничить вероятность ошибки более легко вычисляемыми функциями, но окончательной проверкой всегда является реальное функционирование. В тексте мы ограничились простой процедурой Кинга (1967), выбрав ее прежде всего из-за ее близкой связи с группировкой. Отличное представление математических методов уменьшения размерности дано Мейзелом (1972).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Августсон, Минкер (Augustson J. G., Minker J.)
An analysis of some graph theoretical cluster techniques, *J. ACM*, **17**, 571—588 (October 1970).

Агреула (Agrawala A. K.)
Learning with a probabilistic teacher, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **IT-16**, 373—379 (July 1970).

Болл (Ball G. H.)
Data analysis in the social sciences: what about the details?, Proc. FJCC, pp. 533—560 (Spartan Books, Washington, D. C., 1965).

Болл, Холл (Ball G. H., Hall D. J).
A clustering technique for summarizing multivariate data, *Behavioral Science*, **12**, 153—155 (March 1967).

Болл, Холл (Ball G. H., Hall D. J.)
Some implications of interactive graphic computer systems for data analysis and statistics, *Technometric*, **12**, 17—31 (Ferbuary 1970).

Большев Л. Н.
Уточнение неравенства Крамера — Рао, *Теор. вер. и ее применение*, **6**, № 3, 319—326 (1961).

Боннер (Bonner R. E.)
On some clustering techniques, *IBM Journal*, **8**, 22—32 (January 1964).

Ватанабе (Watanabe M. S.)
Knowing and Guessing (John Wiley, New York, 1969).

Вишарт (Wishart D.)
Mode analysis: a generalization of nearest neighbor which reduces chaining effects, in Numerical Taxonomy, pp. 282—308, A. J. Cole, ed. (Academic Press, London and New York, 1969).

Вольф (Wolfe J. H.)
Pattern clustering by multivariate mixture analysis, *Multivariate Behavioral Research*, **5**, 329—350 (July 1970).

Говер и Росс (Gower J. C., Ross G. J. S.)
Minimum spanning trees and single linkage cluster analysis, *Appl. Statistics*, 18, № 1, 54—64 (1969).
Грин, Кармон (Green P. E., Carmone F. J.)
Multidimensional Scaling and Related Techniques in Marketing Analysis (Allyn and Bacon, Boston, Mass., 1970).
Дей (Day N. E.)
Estimating the components of a mixture of normal distributions, *Biometrika*, 56, 463—474 (December 1969).
Дёч (Doetsch G.)
Zerlegung einer Funktion in Gausche Fehlerkurven und zeitliche Zuruckverfolgung eines Temperaturzustandes, *Mathematische Zeitschrift*, 41, 283—318 (1936).
Джонс (Jones K. L.)
Problems of grouping individuals and the method of modality, *Behavioral Science*, 13, 496—511 (November 1968).
Джонсон (Johnson S. C.)
Hierarchical clustering schemes, *Psychometrika*, 32, 241—254 (September 1967).
Дорофеюк А. А.
Алгоритмы автоматической классификации, *Автоматика и телемеханика*, 32, 1928—1958 (Декабрь, 1971).
Дэйли (Daly R. F.)
The adaptive binary-detection problem on the real line, Technical Report 2003—3, Stanford University, Stanford, Calif. (February 1962).
Кейзи, Надь (Casey R. G., Nagy G.)
An autonomous reading machine, *IEEE Trans. Comp.*, C-17, 492—503 (May 1968).
Кинг (King B. F.)
Stepwise clustering procedures, *J. American Statistical Assn.*, 62, 86—101 (March 1967).
Ковер (Cover T. M.)
Learning in pattern recognition, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 111—132, S. Watanabe, ed. (Academic Press, New York, 1969).
Колверт (Calvert T. W.)
Projections of multidimensional data for use in man computer graphics, Proc. FJCC, pp. 227—231 (Thompson Book Co., Washington, D. C., 1968).
Крускал (Kruskal J. B.)
Multidimensional scaling by optimizing goodness of fit to a nonmetric hypothesis, *Psychometrika*, 29, 1—27 (March 1964a).
Крускал (Kruskal J. B.)
Nonmetric multidimensional scaling: a numerical method, *Psychometrika*, 29, 115—129 (June 1964b).
Кунс (Kuhns J. L.)
Mathematical analysis of correlation clusters, in Word correlation and automatic indexing, Progress Report № 2, C 82—OU1, Ramo-Wooldridge Corporation, Canoga Park, Calif. (December 1959).
Купер Д., Купер П. (Cooper D. B., Cooper P. W.)
Nonsupervised adaptive signal detection and pattern recognition, *Information and Control*, 7, 416—444 (September 1964).
Купер П. (Cooper P. W.)
Some topics on nonsupervised adaptive detection for multivariate normal distributions, in Computer and Information Sciences — II, pp. 123—146, J. T. Tou, ed. (Academic Press, New York, 1967).
Купер П. (Cooper P. W.)
Nonsupervised learning in statistical pattern recognition, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 97—109, S. Watanabe, ed. (Academic Press, New York, 1969).

Ланс, Вильямс (Lance G. N., Williams W. T.)
A general theory of classificatory sorting strategies. 1. Hierarchical systems, *Computer Journal*, **9**, 373—380 (February 1967).

Лин (Ling R. F.)
Cluster Analysis, Technical Report № 18, Department of Statistics, Yale University, New Haven, Conn. (January 1971).

Льюис (Lewis P. M.)
The characteristic selection problem in recognition systems, *IRE Trans. Info. Theory*, **IT-8**, 171—178 (February 1962).

Маккуин (MacQueen J.)
Some methods for classification and analysis of multivariate observations, in Proc. Fifth Berkeley Symposium on Math. Stat. and Prob., 1, 281—297, L. M. LeCam and J. Neyman, eds. (University of California Press, Berkeley and Los Angeles, Calif., 1967).

Матсон, Даммон (Mattson R. L., Dammann J. E.)
A technique for detecting and coding subclasses in pattern recognition problems, *IBM Journal*, **9**, 294—302 (July 1965).

Меджисси (Medgyessy P.)
Decomposition of Superpositions of Distribution Functions (Plenum Press, New York, 1961).

Мейзел (Meisel W. S.)
Computer-Oriented Approaches to Pattern Recognition (Academic Press, New York and London, 1972).

Мерилл, Грин (Marill T., Green D. M.)
On the effectiveness of receptors in recognition systems, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-9**, 11—17 (January 1963).

Миллер (Miller R. G.)
Statistical prediction by discriminant analysis, *Meteorological Monographs*, **4**, 25 (October 1962).

Патрик (Patrick E. A.)
(Interspace) Interactive system for pattern analysis, classification, and enhancement, paper presented at the Computers and Communications Conference, Rome, N. Y. (September 1969).

Патрик, Костелло, Мондс (Patrick E. A., Costello J. P., Monds F. C.)
Decision directed estimation of a two class decision boundary, *IEEE Trans. Comp.*, **C-19**, 197—205 (March 1970).

Патрик, Хенкок (Patrick E. A., Hancock J. C.)
Nonsupervised sequential classification and recognition of patterns, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-12**, 362—372 (July 1966).

Пирсон (Pearson K.)
Contributions to the mathematical theory of evolution, Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 185, 71—110 (1894).

Прим (Prim R. C.)
Shortest connection networks and some generalizations, *Bell System Technical Journal*, **36**, 1389—1401 (November 1957).

Ричардсон (Richardson M. W.)
Multidimensional psychophysics, *Psychological Bulletin*, **35**, 659—660 (1938).

Саммон (Sammon J. W., Jr.)
A nonlinear mapping for data structure analysis, *IEEE Trans. Comp.*, **C-18**, 401—409 (May 1969).

Саммон (Sammon J. W., Jr.)
Interactive pattern analysis and classification, *IEEE Trans. Comp.*, **C-19**, 594—616 (July 1970).

Себестьян (Sebestyen G. S.)
Pattern recognition by an adaptive process of sample set construction, *IRE Trans. Info. Theory*, **IT-8**, S82—S91 (September 1962).

Сокаль, Сниф (Sokal R. R., Sneath P. H. A.)
Principles of Numerical Taxonomy (W. H. Freeman, San Francisco, Calif., 1963).

Спреджинс (Spragins J.)
Learning without a teacher, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-12**, 223—240 (April 1966).

Стейнат (Stanat D. F.)
Unsupervised learning of mixtures of probability functions, in Pattern Recognition, pp. 357—389, L. Kanal, ed. (Thompson Book Co., Washington, D. C., 1968).

Стивенс (Stevens S. S.)
Measurement, statistics, and the schemapiric view, *Science*, **161**, 849—856 (30 August 1968).

Стэнли, Лендэрис, Найноу (Stanley G. L., Lendaris G. G., Nienow W. C.)
Pattern Recognition Program, Technical Report 567—16, AC Electronics Defense Research Laboratories, Santa Barbara, Calif. (1967).

Торндайк (Thorndike R. L.)
Who belongs in the family? *Psychometrika*, **18**, 267—276 (1953).

Трайон (Tryon R. C.)
Cluster Analysis (Edwards Brothers, Ann Arbor, Mich., 1939).

Трайон, Бейли (Tryon R. C., Bailey D. E.)
The BC TRY computer system of cluster and factor analysis, *Multivariate Behavioral Research*, **1**, 95—111 (January 1966).

Трайон, Бейли (Tryon R. C., Bailey D. E.)
Cluster Analysis (McGraw-Hill, New York, 1970).

Тэйчер (Teicher H.)
Identifiability of mixtures, *Ann. Math. Stat.*, **32**, 244—248 (March 1961).

Тэйчер (Teicher H.)
Identifiability of finite mixtures, *Ann. Math. Stat.*, **34**, 1265—1269 (December 1963).

Флеш, Зубин (Fleiss J. L., Zubin J.)
On the methods and theory of clustering, *Multivariate Behavioral Research*, **4**, 235—250 (April 1969).

Фрелик (Fralick S. C.)
Learning to recognize patterns without a teacher, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-13**, 57—64 (January 1967).

Фридман, Рубин (Friedman H. P., Rubin J.)
On some invariant criteria for grouping data, *J. American Statistical Assn.*, **62**, 1159—1178 (December 1967).

Фукунага, Кунц (Fukunaga K., Koontz W. L. G.)
A criterion and an algorithm for grouping data, *IEEE Trans. Comp.*, **C-19**, 917—923 (October 1970).

Хартиган (Hartigan J. A.)
Representation of similarity matrices by trees, *J. American Statistical Assn.*, **62**, 1140—1158 (December 1967).

Хесселблад (Hasselblad V.)
Estimation of parameters for a mixture of normal distributions, *Technometrics*, **8**, 431—444 (August 1966).

Хилборн, Лейниотис (Hillborn C. G., Jr., Lainiotis D. G.)
Optimal unsupervised learning multicategory dependent hypotheses pattern recognition, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-14**, 468—470 (May 1968).

Холл, Теппинг, Болл (Hall D. J., Tepping B., Ball G. H.)
Theoretical and experimental clustering characteristics for multivariate random and structured data, in Applications of cluster analysis to Bureau of the Census data, Final Report, Contract Cco-9312, SRI Project 7600, Stanford Research Institute, Menlo Park, Calif. (1970).

Хэрэлик, Диншейн (Haralick R. M., Dinstein I.)
An iterative clustering procedure, *IEEE Transactions on Sys., Man, and Cyb.*, **SMC-1**, 275—289 (July 1971).
Хэрэлик, Келли (Haralick R. M., Kelly G. L.)
Pattern recognition with measurement space and spatial clustering for multiple images, *Proc. IEEE*, **57**, 654—665 (April 1969).
Цань (Zahn C. T.)
Graph-theoretical methods for detecting and describing gestalt clusters, *IEEE Trans. Comp.*, **C-20**, 68—86 (January 1971).
Шепард (Shepard R. N.)
The analysis of proximities: multidimensional scaling with an unknown distance function, *Psychometrika*, **27**, 125—139, 219—246 (1962).
Эндрюс, Атрубин, Ху (Andrews D. R., Atrubin A. J., Hu K. C.)
The IBM 1975 Optical Page Reader. Part 3: Recognition logic development, *IBM Journal*, **12**, 334—371 (September 1968).
Якович (Yakowitz S. J.)
Unsupervised learning and the identification of finite mixtures, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-16**, 330—338 (May 1970).
Якович, Спреджинс (Yakowitz S. J., Spragins J. D.)
On the identifiability of finite mixtures, *Ann. Math. Stat.*, **39**, 209—214 (February 1968).
Янг, Коралуппи (Young T. Y., Coraluppi G.)
Stochastic estimation of a mixture of normal density functions using an information criterion, *IEEE Trans. Info. Theory*, **IT-16**, 258—263 (May 1970).

Задачи

1. Предположим, что x может принимать значения 0, 1, ..., m и что $P(x|\theta)$ — смесь c биномиальных распределений

$$P(x \mid \theta) = \sum_{j=1}^{c} \binom{m}{x} \theta_j^m (1-\theta_j)^{m-x} P(\omega_j).$$

Предполагая, что априорные вероятности известны, объясните, почему эта смесь неидентифицируема, если $m<c$. Как изменится ответ, если априорные вероятности тоже неизвестны?

2. Пусть $\mathbf{x}$ — двоичный вектор и $P(\mathbf{x}|\theta)$ — смесь из c многомерных распределений Бернулли:

$$P(\mathbf{x} \mid \theta) = \sum_{i=1}^{c} P(\mathbf{x} \mid \omega_i, \theta_i) P(\omega_i),$$

где

$$P(\mathbf{x} \mid \omega_i, \theta_i) = \prod_{j=1}^{d} \theta_{ij}^{x_j} (1-\theta_{ij})^{1-x_j}.$$

а) Покажите, что

$$\frac{\partial \log P(\mathbf{x} \mid \omega_i, \theta_i)}{\partial \theta_{ij}} = \frac{\mathbf{x}_i - \theta_{ij}}{\theta_{ij}(1-\theta_{ij})}.$$

б) Используя общее уравнение оценки по максимуму правдоподобия, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия $\hat{\theta}_i$ для θ_i должна удовлетворять

$$\hat{\theta}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)\,\mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)}.$$

3. Рассмотрим одномерную нормальную смесь

$$p(\mathbf{x} \mid \theta) = \frac{P(\omega_1)}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_1} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2\right] + \frac{P(\omega_2)}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right].$$

Напишите программу для ЭВМ, которая использует общее уравнение максимального правдоподобия из п. 6.4.3 для итерационной оценки неизвестных средних, дисперсий и априорных вероятностей. Используя эту программу, найдите оценки по максимуму правдоподобия этих параметров для данных из табл. 6.1. (*Ответ*: $\hat{\mu}_1 = -2{,}404$, $\hat{\mu}_2 = 1{,}491$, $\hat{\sigma}_1 = 0{,}577$, $\hat{\sigma}_2 = 1{,}338$, $\hat{P}(\omega_1) = 0{,}268$, $\hat{P}(\omega_2) = 0{,}732$.)

4. Пусть $p(\mathbf{x}|\theta)$ — нормальная плотность смеси из c компонент с $p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \sigma_i^2 I)$. Используя результаты разд. 6.3, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для σ_i^2 должна удовлетворять соотношению

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{\frac{1}{d}\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i) \| \mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i \|^2}{\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)},$$

где $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ и $P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\theta}_i)$ заданы уравнениями (15) и (17) соответственно.

5. Вывод уравнений для оценки по максимуму правдоподобия параметров плотности смеси был сделан при предположении, что параметры в каждой плотности компонент функционально независимы. Вместо этого предположим, что

$$p(\mathbf{x} \mid \alpha) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x} \mid \omega_j, \alpha)\, P(\omega_j),$$

где α — параметр, который появляется в некоторых плотностях компонент. Пусть l — логарифмическая функция правдоподобия для n выборок. Покажите, что

$$\frac{\partial l}{\partial \alpha} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{c} P(\omega_j \mid \mathbf{x}_k, \alpha)\, \frac{\partial \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \alpha)}{\partial \alpha},$$

где

$$P(\omega_j \mid \mathbf{x}_k, \alpha) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \alpha)\, P(\omega_j)}{p(\mathbf{x}_k \mid \alpha)}.$$

6. Пусть $p(\mathbf{x}|\omega_i, \theta_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma)$, где Σ — общая матрица ковариаций для c плотностей компонент. Пусть σ_{pq} — pq-й элемент Σ, σ^{pq} — pq-й элемент Σ^{-1}, $x_p(k)$ — p-й элемент $\mathbf{x}_k$ и $\mu_p(i)$ — p-й элемент $\boldsymbol{\mu}_i$.

а) Покажите, что

$$\frac{\partial \log p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \theta_i)}{\partial \sigma^{pq}} = \left(1 - \frac{\delta_{pq}}{2}\right)[\sigma_{pq} - (x_p(k) - \mu_p(i))(x_q(k) - \mu_q(i))].$$

б) Используя этот результат и результат задачи 5, покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для Σ должна удовлетворять

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k \mathbf{x}_k^t - \sum_{i=1}^{c} \hat{P}(\omega_i)\, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^t,$$

где $\hat{P}(\omega_i)$ и $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ — оценки по максимуму правдоподобия, данные уравнениями (14) и (15) в тексте.

7. Покажите, что оценка по максимуму правдоподобия для априорной вероятности может быть равна нулю, рассмотрев следующий особый случай. Пусть $p(x|\omega_1) \sim N(0, 1)$ и $p(x|\omega_2) \sim N(0, (1/2))$, так что $P(\omega_1)$ — единственный неизвестный параметр плотности смеси

$$p(x) = \frac{P(\omega_1)}{\sqrt{2\pi}} e^{-(1/2)x^2} + \frac{(1 - P(\omega_1))}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}.$$

Покажите, что оценка по максимальному правдоподобию $\hat{P}(\omega_1)$ для $P(\omega_1)$ равна нулю, если имеется одна выборка x_1 и $x_1^2 < \log 2$. Каково значение $\hat{P}(\omega_1)$, если $x_1^2 > \log 2$?

8. Рассмотрим одномерную нормальную плотность смеси

$$p(x \mid \mu_1, \ldots, \mu_c) = \sum_{j=1}^{c} \frac{P(\omega_j)}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x - \mu_j}{\sigma}\right)^2\right],$$

в которой у всех компонент одна и та же известная дисперсия σ^2. Предположим, что средние настолько отдалены друг от друга по сравнению с σ, что для всех x всеми, кроме одного, членами этой суммы можно пренебречь. Используя эвристические соображения, покажите, что значение

$$\max_{\mu_1, \ldots, \mu_c} \left\{\frac{1}{n} \log p(x_1, \ldots, x_n \mid \mu_1, \ldots, \mu_c)\right\},$$

должно быть равно приблизительно

$$\sum_{j=1}^{c} P(\omega_j) \log P(\omega_j) - \frac{1}{2} \log 2\pi\sigma e,$$

когда число n независимых выборок велико. Сравните его со значением, показанным на рис. 6.1.

9. Пусть θ_1 и θ_2—неизвестные параметры для плотностей компонент $p(x|\omega_1, \theta_1)$ и $p(x|\omega_2, \theta_2)$ соответственно. Предположим, что θ_1 и θ_2 первоначально статистически независимы, так что $p(\theta_1, \theta_2) = p_1(\theta_1) p_2(\theta_2)$. Покажите, что, после того как была получена одна выборка x_1 из плотности смеси, $p(\theta_1, \theta_2|x_1)$ не может быть представлена в виде

$$p(\theta_1 \mid x_1)\, p_2(\theta_2 \mid x_1),$$

если

$$\frac{\partial p(x \mid \omega_i, \theta_i)}{\partial \theta_i} \neq 0, \quad i = 1, 2.$$

Часть II

АНАЛИЗ СЦЕН

Глава 7

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ И ИХ ПЕРВОНАЧАЛЬНЫЕ УПРОЩЕНИЯ

7.1. ВВЕДЕНИЕ

Цель, которую мы преследуем во второй части этой книги, заключается в том, чтобы изложить основы автоматического анализа сцен. Нас будут интересовать методы упрощения и описания изображений при помощи ЭВМ, позволяющие давать ответ на вопрос или выполнять команды такого рода: «Изображен ли на картинке стул?», «Назови все объекты на картинке», «Изображают ли две картинки один и тот же объект?» или в более общем случае: «Опиши сцену». Чтобы читатель почувствовал всю широту данной проблемы, перечислим некоторые из многих применений анализа сцен.

В первых работах в центре внимания было опознавание знаков, имеющее важное практическое значение и по сей день. Опознавание знаков представляет собой скорее задачу классификации, чем составления описания, поэтому здесь вполне применим математический аппарат, который обсуждался в ч. I. В этом случае, как и вообще в задачах классификации, назначение методов анализа сцен, которые мы будем рассматривать ниже, заключается в выделении множества признаков для классификатора изображений. Интерес к совсем иной области проблем связан с теми исследованиями специалистов по физике элементарных частиц, в ходе которых получают большое число снимков взаимодействия частиц в пузырьковых и искровых камерах. Задача этих исследований обычно заключается в том, чтобы обнаруживать определенные события путем анализа треков на фотографиях. Третий важный круг задач связан с биомедицинскими исследованиями. Большое число препаратов, изучаемых визуально под микроскопом, которые просматриваются в ходе как клинических, так и чисто научных исследований, послужило естественной причиной разработки методов автоматического анализа. И наконец, как последний пример: существуют роботы-манипуля-

торы и роботы-тележки, возможности и гибкость которых значительно возрастают, если они снабжены сенсорными системами, и особенно зрением.

Следует отметить, что само по себе название проблемной области еще ничего не говорит о трудностях, с которыми приходится сталкиваться при решении связанных с этой областью задач анализа сцен. Возьмем в качестве примера опознавание знаков, которое в некоторых отношениях является сравнительно простой областью задач. Трудность задачи опознавания знаков зависит от многих причин: выполнены ли знаки рукой человека или машиной; если машиной, то сколько образцов типографского шрифта использовалось — один или несколько; если рукой человека, то одним человеком или несколькими и т. д. и т. п. Следовательно, в анализе сцен речь идет не только о большом разнообразии проблемных областей, но и о значительном многообразии задач в пределах одной области. Конечно, было бы наивно предполагать, что единая методика или небольшой набор технических приемов были бы применимы ко всем задачам из такого широкого спектра проблем. На самом деле из-за такого многообразия трудно охарактеризовать анализ сцен в целом: можно лишь отметить, что, по существу, этот процесс является процессом упрощения. Главная проблема заключается в том, чтобы преобразовать изображение, представленное, возможно, десятками тысяч битов информации, в «описание» или «классификацию», представленную лишь несколькими десятками битов. Поэтому нас будут интересовать методы упрощения изображений — подавления несущественных деталей, описания форм и размеров объектов на изображении, объединения отдельных частей изображения в осмысленные образования — и вообще методы уменьшения сложности данных.

7.2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ

Предположим, что у нас имеется обыкновенный фотографический диапозитив и мы хотим проанализировать его с помощью цифровой вычислительной машины. Одной из первых задач является, очевидно, выбор способа представления изображения, пригодного для машины. Существует много вариантов такого выбора, но мы можем упорядочить их, обратив внимание на то, что черно-белое изображение можно рассматривать как вещественную функцию двух переменных. Для определенности предположим, что изображение лежит в плоскости, снабженной координатными осями x и y. Определим *функцию интенсивности* [1] $g(x, y)$ как величину, пропорциональную интенсивности света, падающего на изображение в точке (x, y) [2], [3]. Интенсивность

[1] В оригинале picture function.— *Прим. ред.*

[2] Не следует смешивать применяемое здесь обозначение $g(x, y)$ с разделяющими функциями, описанными в ч. 1.

[3] Подразумевается изображение при проектировании слайда.— *Прим. ред.*

изображения в некоторой точке называется также *уровнем полутонов* или *яркостью*. Во всяком случае, с математической точки зрения изображение определяется путем задания его функции интенсивности.

Теперь, поскольку мы условились рассматривать изображения как функции, очевидно, что любые средства для представления функции в цифровой вычислительной машине могут быть использованы и для представления изображения. Некоторые методы можно отвергнуть сразу же как неподходящие для решаемой задачи. Многочлены, например, обычно задают в памяти машины набором их коэффициентов, но немногие интересующие нас функции интенсивности представляют собой просто многочлены невысокой степени. И вообще, поскольку функция интенсивности, представляющая интерес, редко имеет простую аналитическую форму, ее задают обычно путем измерения ее значений в достаточно большом числе дискретных точек в плоскости (X, Y) и запоминания величин этих отсчетов. Этот процесс называется *взятием отсчетов* или *квантованием*. Для того чтобы задать алгоритм квантования, мы должны сначала установить, где нужно брать отсчеты. Самым простым решением является разбиение плоскости изображения с помощью сетки на квадратные клетки и взятие отсчета функции интенсивности в центре каждой клетки. Далее, функция интенсивности, вообще говоря, может принимать любые значения между некоторым минимумом (черное) и максимумом (белое), в то время как в цифровой вычислительной машине можно задавать только конечное число значений. Поэтому мы должны также разбить диапазон амплитуд функции интенсивности на ограниченное число градаций. Сделав это, мы зададим некоторый алгоритм представления исходной функции интенсивности массивом целых чисел, где каждый элемент массива приблизительно определяет уровень полутонов соответствующей клетки изображения.

Рассмотрим несколько более подробно проблему разбиения полутоновой шкалы на ряд дискретных градаций. Простейший способ выполнить эту задачу состоит в разбиении диапазона изменения интенсивностей изображения от черного к белому на одинаковые интервалы. Если мы выберем этот вариант, мы должны только определить число градаций, или, другими словами, степень подробности разбиения. К сожалению, по этому вопросу не существует теоретического обоснования, и поэтому обычно приходится идти на некоторый компромисс между желанием точно задать изображение и необходимостью сохранять объем данных для вычислений в разумных пределах. Не обязательно, однако, выбирать ступени квантования одинаковыми. Пусть, например, у нас есть основания полагать, что большинство деталей в изображении приходится на темные области. Тогда, если число градаций не должно превосходить некоторого заданного значения, имело бы смысл, конечно,

квантовать неравномерно. Мы бы тогда разбили «темные» области полутоновой шкалы на сравнительно мелкие ступени, а «светлые» области — на сравнительно крупные. Если же у нас нет специальных предварительных знаний об изображении, можно руководствоваться сведениями об устройстве зрительной системы человека, реакция которой на освещенность приблизительно описывается логарифмической характеристикой. Другими словами, логарифмические [1]) изменения физической интенсивности зрительного стимула воспринимаются человеком как «в равной степени заметные на глаз» изменения. Этот феномен (который, по-видимому, имеет место и для слухового и тактильного стимулов) подсказывает, что следует взять сначала логарифм от функции интенсивности и квантовать затем равномерно величину $\log g(x, y)$.

Перейдем теперь к вопросу о шаге сетки отсчетов. Эта проблема аналогична проблеме квантования полутоновой шкалы, но здесь мы располагаем некоторым теоретическим руководством в виде известной теоремы отсчетов Шеннона [2]). Для обсуждения этой теоремы требуются некоторые сведения о двумерных преобразованиях Фурье, поэтому мы отложим этот вопрос до следующей главы. Можно лишь отметить, что плоскость изображения может быть разбита не только с помощью сетки из квадратных элементов. В такой сетке два элемента, имеющие общий угол, не всегда имеют общую сторону. Эта особенность при осуществлении ряда операций по обработке изображения, которые будут рассматриваться позднее, вызывает определенные неудобства. Для устранения этих неудобств иногда предлагают разбивать плоскость изображения на шестиугольники, но во многих случаях достигнутое преимущество не оправдывает связанных с таким вариантом дополнительных усложнений. В дальнейшем всюду, где это удобно, мы будем полагать, что изображение может быть представлено обычной матрицей, вещественные элементы которой определяют (приближенно) значения функции интенсивности в соответствующей области плоскости изображения. В тех случаях, когда нет опасности различного толкования, мы будем обозначать элемент i-й строки j-го столбца этой матрицы через $g(i, j)$ и тогда будем говорить о g как о *дискретной функции интенсивности*. Неквантованная функция интенсивности $g(x, y)$ будет называться *аналоговой* функцией интенсивности. Для удобства мы условимся также, что малые и большие значения квантованной функции интенсивности изображают соответственно темные и светлые уровни этой величины.

В качестве примера, иллюстрирующего изложенное выше, рассмотрим рис. 7.1 и 7.2. На рис. 7.1 показана трехмерная сцена, содержащая объекты простой геометрической формы. Изображение

[1]) Видимо, оговорка; по смыслу — «экспоненциальные». — *Прим. перев.*
[2]) См. примечание на стр. 323.— *Прим. перев.*

было взято прямо с обычного телевизионного монитора, но для наших непосредственных целей безразлично, имеем ли мы дело с телевизионными изображениями, фотографическими диапозитивами или любыми другими видами изображений. На рис. 7.2 показан квантованный вариант изображения рис. 7.1. Мы использовали квадратную сетку отсчетов со 120 элементами по каждой стороне и проквантовали полутоновую шкалу на 16 равномерно расположенных уровней. Само по себе квантованное изображение представляет собой, конечно, некоторую матрицу, но мы вывели на экран этот массив чисел в виде «картинки», т. е. как совокупность дискретных точек.

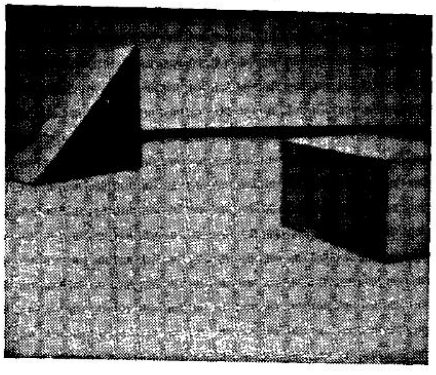


Рис. 7.1. Изображение на телевизионном мониторе.

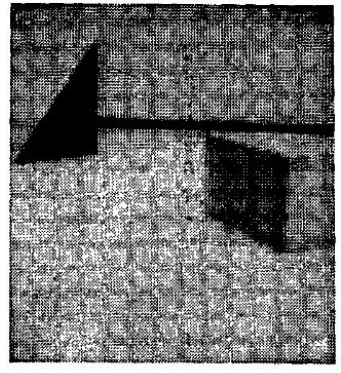


Рис. 7.2. Дискретное изображение.

Каждая точка в изображенном массиве имеет один из 16 полутоновых уровней, и номер этого уровня определяется соответствующим числом в матрице. Можно было бы заметить здесь, что задний край клина едва отличим в квантованном изображении от стены позади этого клина. Действительно, между этими областями существует разность интенсивности в один уровень квантования. К сожалению, на середине пола и стены имеется много перепадов интенсивности в один уровень квантования, вызванных тенями на исходном изображении. Следовательно, в упрощенном изображении окружающего мира разность в один полутоновый уровень квантования может считаться «незначительной». Мы не будем подробно останавливаться сейчас на этом вопросе, но можем сказать заранее, что задача определения, какие полутоновые перепады «значительные», является важной проблемой, которая, по-видимому, в общем случае не допускает быстрых и легких решений.

7.3. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Как мы отметили ранее, процесс анализа сцены является по существу процессом упрощения — сложный объект (исходное изображение) превращается в более простой с помощью нескольких последовательных операций. Естественным этапом этой последовательности является превращение исходного изображения в контурный рисунок. Мы надеемся, что такой шаг сохранил бы существенные детали исходного изображения, сократив в то же время объем вычислений при последующих операциях. Для перехода к контурным изображениям существуют также психологические мотивы. Эксперименты показали, что внимание человека концентрируется в основном на границах между более или менее однородными областями. Мы признаем, конечно, что упрощение изображения до контурного рисунка связано с некоторым риском. Контурное изображение обычно содержит меньше информации, чем исходное, и нет гарантии, что потерянная информация является несущественной. Пока, однако, мы примем, что преобразование изображения в контурный рисунок является при некоторых обстоятельствах полезным, и сосредоточим наше внимание на способах осуществления этой операции.

Контурное изображение может быть получено из исходного путем выделения областей, содержащих резкие переходы от темного к светлому, и подавления областей с примерно однородной интенсивностью. Другими словами, контуры есть края, а края — это по определению переходы между двумя существенно различными интенсивностями. На языке функций интенсивности край — это область плоскости (X, Y), где велик градиент функции $g(x, y)$. Для получения контурного рисунка, таким образом, требуется оценка величины модуля градиента функции. Эту величину можно вычислить, если известны производные этой функции по каким-либо двум ортогональным направлениям. Следовательно, нужно только выбрать два ортогональных направления и способ приближенного вычисления (одномерной) производной, чтобы иметь все необходимые составляющие алгоритма получения контурных рисунков.

В качестве примера, представляющего интерес в историческом и практическом плане, аппроксимируем модуль градиента в точке изображения (i, j) следующим образом:

$$\| \nabla g(i, j) \| \approx R(i, j) = \sqrt{[g(i, j) - g(i+1, j+1)]^2 + [g(i, j+1) - g(i+1, j)]^2}.$$

Заметим, что здесь в качестве ортогональных направлений выбраны линии, наклон которых равен $+1$ и -1. Схематически мы рассматриваем для клетки (i, j) окно размером 2×2, элементы которого по

диагонали связаны операцией вычитания:

i,j	$i,j+1$
$i+1,j$	$i+1,j+1$

Направленная производная для каждого направления аппроксимируется просто разностью соседних элементов. Оператор $R(i, j)$ иногда называют *перекрестным оператором Робертса*. Рассмотрим пока качественно, в чем заключается его действие. Если точка (i, j) находится в области однородной интенсивности, значение $R(i, j)$, как и можно было ожидать, равно 0. Если между столбцами j и $j+1$ наблюдается перепад интенсивности, $R(i, j)$ имеет большую ве-

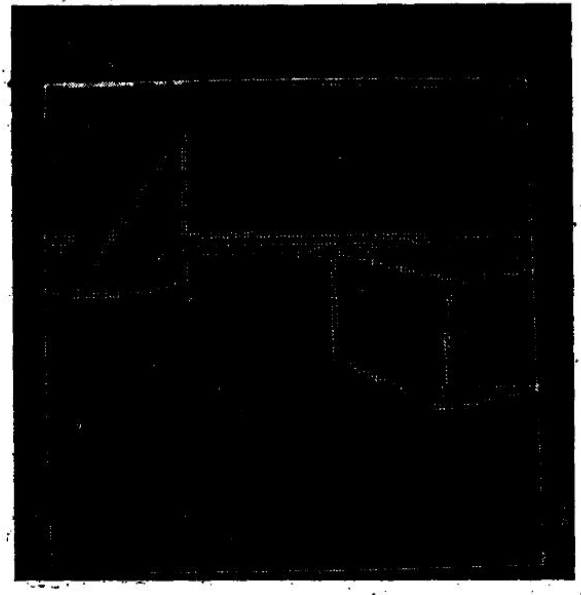


Рис. 7.3. Градиентное изображение.

личину; то же самое происходит, если перепад наблюдается между строками i и $i+1$. Для повышения скорости вычислений перекрестный оператор Робертса часто упрощают путем использования абсолютных значений вместо квадратов и квадратных корней. Определим оператор $F(i, j)$:

$$F(i, j) = |g(i, j) - g(i+1, j+1)| + |g(i, j+1) - g(i+1, j)|.$$

Ясно, что $R(i, j) \leqslant F(i, j) \leqslant \sqrt{2}\, R(i, j)$ и $F(i, j)$ в качественном отношении ведет себя так же, как и $R(i, j)$.

На рис. 7.3 показан результат применения оператора F к дискретному изображению рис. 7.2 с последующим выводом на экран элементов (i, j), для которых $F(i, j) > 2$. Наиболее заметный дефект этого изображения заключается в том, что задний край клина потерян. Как мы отмечали выше, между интенсивностями с обеих сторон от пропавшей линии существует разность только в один полутоновый уровень квантования. Если такую разность считать существенной и сделать пороговую величину меньше 2, появится недопустимо большое число «ложных» линий на полу и на стене. В целом, однако, большое количество «существенной» информации, содержащейся в рис. 7.2 здесь сохранилось.

Теперь отвлечемся на некоторое время и поговорим о терминологии. Изображение, показанное на рис. 7.3, называют обычно *градиентным изображением*. Процесс получения градиентного изображения широко известен как *пространственное дифференцирование*, *выделение контуров*, *повышение резкости* или просто *взятие градиента*. Строго говоря, на рис. 7.3 показано градиентное изображение, ограниченное порогом. Так как пороговое ограничение градиентного изображения является весьма обычным приемом, изображение до этой операции неточно называют аналоговым градиентным изображением, каким оно, конечно, не является.

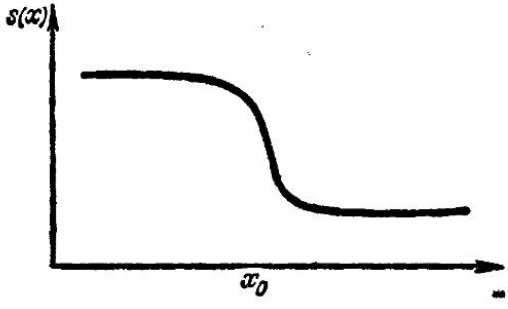


Рис. 7.4. Идеальный край.

Во избежание дальнейшей путаницы оставим пока терминологические рассуждения.

Теперь рассмотрим несколько подробнее задачу взятия градиента. Трудность здесь порождается существованием шумов. Мы можем сказать, что с точки зрения теории связи дискретная функция интенсивности $g(i, j)$ есть сумма двух функций: «идеального» изображения или сигнала $s(i, j)$ и чисто шумового изображения $n(i, j)$. Проблема возникает из-за того, что на самом деле мы хотим оценить градиент не суммы g, а идеального изображения s. Для иллюстрации этого ограничимся одномерным случаем и для простоты рассмотрим только аналоговые функции. На рис. 7.4 показана одно-

мерная идеальная функция интенсивности [1]) $s(x)$, которая претерпевает резкое изменение вблизи точки x_0. К сожалению, в нашем распоряжении имеется только сумма $g(x)=s(x)+n(x)$ (рис. 7.5). Какая же процедура подойдет для оценки положения точки x_0 по функции $g(x)$? Интуиция подсказывает, что решение должно быть связано с операцией усреднения. Нам желательно сгладить функцию

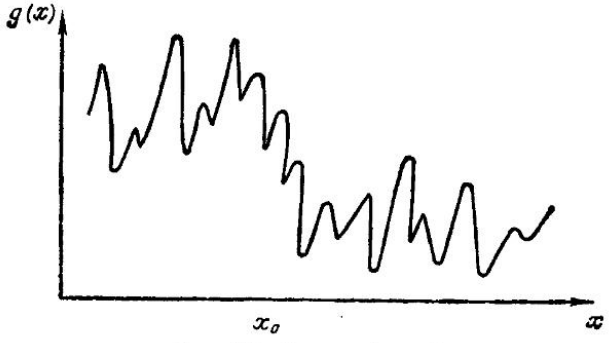


Рис. 7.5. Реальный край.

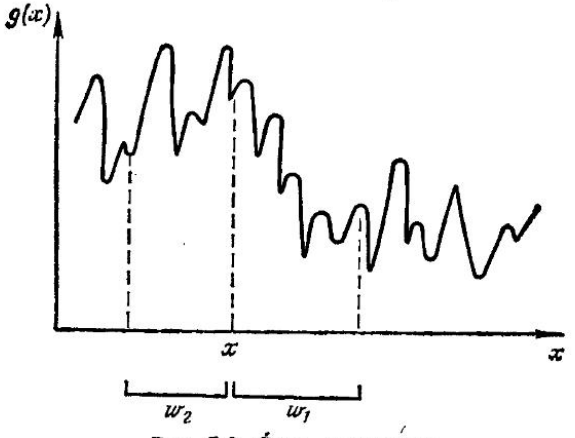


Рис. 7.6. Окна усреднения.

g настолько, чтобы подавить в среднем самый сильный шум, но в то же время не в такой степени, чтобы сделать совершенно незаметным скачок функции s. Действуя эмпирически, можно было бы определить оператор оценки производной $D(x)$ формулой

$$D(x)=\frac{1}{w_1}\int_{x}^{x+w_1} g(u)\,du-\frac{1}{w_2}\int_{x-w_2}^{x} g(u)\,du.$$

[1]) Мы можем интерпретировать одномерное изображение как функцию интенсивности двумерного изображения вдоль некоторого одномерного разреза на плоскости изображения.

Как показано на рис. 7.6, этот оператор выделяет два интервала («окна») длиной w_1 и w_2 непосредственно перед точкой x и после нее, усредняет функцию g по каждому из этих «окон» и вычисляет разность средних величин. Если выбрано окно подходящих размеров, подобный оператор может работать очень хорошо. Для расчета градиента в двумерном изображении точно так же требуется некоторая комбинация усреднения и взятия разностей. По этому принципу был построен ряд операторов для оценки градиента, использующих окна различных размеров.

В качестве примера оператора оценки градиента, использующего окно размером 3×3, рассмотрим следующий оператор [1]), в котором для простоты элементы изображения в этом окне обозначены так:

a	b	c
d	e	f
g	h	i

Определим величину S_x формулой

$$S_x=(c+2f+i)-(a+2d+g)$$

и величину S_y формулой

$$S_y=(g+2h+i)-(a+2b+c).$$

Тогда градиент в точке e можно либо определить с помощью выражения

$$S=\sqrt{S_x^2+S_y^2},$$

либо использовать более эффективное с точки зрения скорости вычислений выражение

$$S=|S_x|+|S_y|.$$

Остановимся на определении S_x. Это определение представляет собой попытку оценить частную производную функции интенсивности в направлении X. Сначала формируются два взвешенных средних значения для оценки интенсивности в точках f и d (нормирующие множители опущены). Затем для расчета частной производной берется разность этих взвешенных средних. Аналогичная операция выполняется при вычислении S_y. Константы взвешивания 1, 2, 1 выбраны, лишь исходя из интуитивных соображений. В следующей главе мы рассмотрим эту проблему с большей математической строгостью и обсудим требования к «оптимальному» оператору оценки градиента.

[1]) Предложен И. Собелем.

7.4. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СГЛАЖИВАНИЕ

В предыдущем разделе мы познакомили читателя с классическим методом борьбы с шумом путем усреднения. Хотя нашей непосредственной целью была оценка градиента функцин, очевидно,

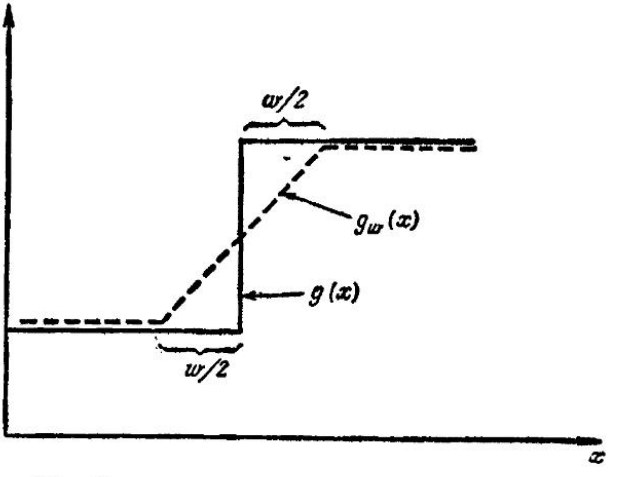


Рис. 7.7а. Пример регуляризации для одномерного случая.

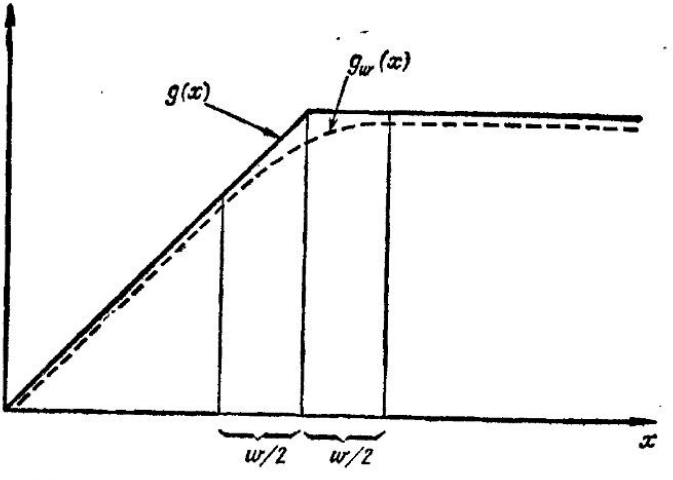


Рис. 7.7б. Другой пример регуляризации для одномерного случая.

что тот же метод в более общем случае может быть использован для «очистки» изображения от шума. Как и прежде, основная идея заключается в том, чтобы заменить величину уровня полутонов в

точке средним значением функции интенсивности в ее непосредственной окрестности. Опасность при усреднении заключается, конечно, в том, что в результате расплываются детали. Для простоты рассмотрим сначала случай с одномерной аналоговой функцией интенсивности $g(x)$. Сглаженная версия $g_w(x)$ определяется формулой

$$g_w(x) = \frac{1}{w} \int_{x-w/2}^{x+w/2} g(u)\,du.$$

Этот процесс называется *регуляризацией* функций. Методами анализа нетрудно доказать, что регуляризация сглаживает функции в некотором точном смысле слова: если функция $g(x)$ разрывна, то функция $g_w(x)$ непрерывна, и если $g(x)$ — непрерывная функция, то $g_w(x)$ имеет непрерывную производную. Эти свойства проиллюстрированы на рис. 7.7а и 7.7б. Заметим, что ширина «переходной области» функции $g_w(x)$ зависит от размера окна. В результате увеличения окна w изображение становится еще более расплывчатым. Наоборот, чем меньше становится окно w, тем точнее функция $g_w(x)$ аппроксимирует функцию $g(x)$. Регуляризованная функция $g_w(x)$ называется также *скользящим* или *текущим средним* функции $g(x)$.

Этот процесс регуляризации непосредственно обобщается на двумерный случай. Для заданной аналоговой функции интенсивности $g(x, y)$ определим регуляризованную функцию $g_w(x, y)$ выражением

$$g_w(x, y) = \frac{1}{A_w} \iint_{w(x, y)} g(u, v)\,du\,dv,$$

где $w(x, y)$ — окно произвольной формы на плоскости изображения с площадью A_w вокруг точки (x, y). В случае дискретной функции интенсивности $g(i, j)$ ее сглаженный вариант $g_w(i, j)$ определим формулой

$$g_w(i, j) = \frac{1}{A_w} \sum_{w(i, j)} \sum g(m, n),$$

где, как и прежде, $w(i, j)$ — окно площадью A_w, окружающее элемент (i, j). Естественно возникает мысль об использовании окна какой-нибудь простой геометрической формы. Если мы решим использовать прямоугольное окно с основанием $2b+1$ и высотой $2h+1$, то регуляризованный вариант функции $g(i, j)$ примет следующий вид:

$$g_w(i, j) = \frac{1}{(2b+1)(2h+1)} \sum_{-b \leqslant m \leqslant b} \sum_{-h \leqslant n \leqslant h} g(i+m, j+n).$$

В качественном отношении регуляризация изображения имеет много общего с расфокусировкой камеры, причем большое окно ус-

реднения соответствует сильной расфокусировке. Этот эффект часто совершенно противоположен тому, что нам хотелось бы получить, поскольку мы предпочитаем иметь дело с возможно более резким и четким изображением. Поэтому регуляризация используется избирательно для определенных целей. Один из случаев, в которых она полезна, связан с обработкой *бинарных* дискретных изображений. Бинарное изображение, как и следовало ожидать,— это изображение только из черных и белых элементов; для любой точки (i, j) величина $g(i, j)$ либо равна 0 (черное), либо 1 (белое). Множество элементов, для которых функция $g(i, j)=1$, называется *объектом*; множество элементов, для которых $g(i, j)=0$, называется *фоном*.

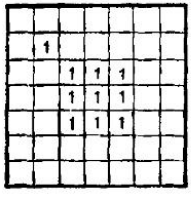


Рис. 7.8.

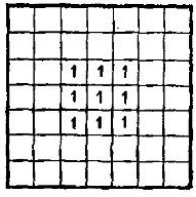


Рис. 7.9. Пример регуляризации для двумерного случая.

Бинарные изображения представляют значительный интерес как сами по себе, так и потому, что они являются результатом других операций по обработке изображения (рис. 7.3 есть бинарное изображение). Для сглаживания бинарного изображения $g(i, j)$ применяется сравнение функции $g_w(i, j)$ с порогом. Если она превышает порог, то значение сглаженной функции равно 1. В противном

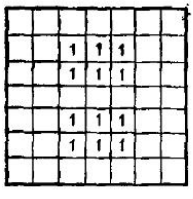


Рис. 7.10.

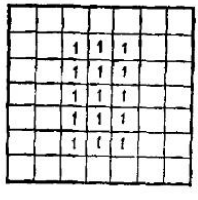


Рис. 7.11. Другой пример регуляризации для двумерного случая.

случае это значение равно 0. Операцию такого типа можно использовать для того, чтобы сделать контур объекта на бинарном изображении более правильным. Предположим, например, что мы применяем окно размером 3×3 и установили порог равным 0,4. Этот

оператор присвоил бы элементу (i, j) на сглаженном изображении значение 1 в том и только том случае, если по крайней мере 4 элемента в окне, окружающем элемент (i, j), были бы 1. В результате сглаживания простого бинарного изображения, показанного на рис. 7.8, получается изображение (рис. 7.9), где мы видим, что выступ контура в верхнем левом углу объекта удален (пустые клетки соответствуют 0). С другой стороны, если ту же самую операцию сглаживания применить к несвязному объекту, показанному на рис. 7.10, в результате получится изображение (рис. 7.11), на котором видно, что промежуток, разделяющий обе половины объекта, целиком заполнен. Если бы мы считали промежуток толщиной в один элемент существенным, то нас несколько разочаровали бы результаты работы данного оператора сглаживания. Другими словами, даже эти очень простые примеры показывают, что регуляризация — это обоюдоострый меч, с которым необходимо обращаться осторожно.

Для бинарных изображений существует еще один метод сглаживания, который часто позволяет добиться более точного контроля, чем при регуляризации. Этот метод называется *логическим усреднением* или *логическим сглаживанием*. Он основан на том, что элементы изображения, которые находятся в пределах усредняющего окна, могут трактоваться как булевы или логические переменные, и величина сглаженной функции интенсивности в точке может быть определена любой булевой функцией этих переменных. В качестве примера предположим, что мы хотим построить логический оператор сглаживания со следующими характеристиками:

а) элемент «0» заменяется на элемент «1» в том и только том случае, если все соседние элементы суть «1»;

б) элемент «1» заменяется на элемент «0» в том и только том случае, если все соседние элементы суть «0».

Для того чтобы удовлетворить этим условиям, нужен оператор, который будет заменять изолированные нули и единицы их логическими дополнениями и оставлять другие части изображения неизменными. Такой оператор целесообразно применять при борьбе с так называемым шумом типа «соль и перец», чье действие на бинарное изображение сводится к случайной замене некоторых элементов их логическими дополнениями. Логический оператор сглаживания, использующий окно размером 3×3 и обладающий требуемыми качествами, можно задать, обозначив для простоты элементы изображения в этом окне так:

a	b	c
d	e	f
g	h	i

Определим величину e', т. е. новое значение интенсивности изображения в центральном элементе окна, с помощью формулы

$$e' = \bar{e}\,(abcdfghi) \vee e\,(a \vee b \vee c \vee d \vee f \vee g \vee h \vee i),$$

где $a \vee b$ означает «a или b», $\bar{a}$ означает «не a» и ab означает «a и b». Легко убедиться, что эта логическая функция обладает нужными качествами. Новое значение e' есть 1 в том и только том случае, если e есть 0 и все соседние элементы суть 1 или если e само равно 1 и по крайней мере один из окружающих его элементов равен 1. Преимущество логического сглаживания по сравнению с регуляризацией заключается в том, что логическое сглаживание позволяет задавать более сложные условия, при которых значение элемента должно меняться. Более того, регуляризация (для бинарных изображений) — это частный случай логического сглаживания, так как численные операции регуляризации также могут определяться с помощью булева выражения. Можно построить и другие булевы операторы, предназначенные специально для борьбы с особыми видами помех или для использования предварительных знаний об изображениях, с которыми предполагается работать.

7.5. СРАВНЕНИЕ С ЭТАЛОНОМ

7.5.1. СРАВНЕНИЕ С ЭТАЛОНОМ — МЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

При решении многих задач анализа сцен анализирующая система сталкивается с той или иной формой следующего простого вопроса: содержит ли сцена изображение заранее заданного объекта? Метод, традиционно используемый для ответа на вопросы этого типа, называется *сравнением с эталоном*. Рассмотрим сначала сравнение с эталоном на простых примерах с бинарными изображениями, а затем распространим наше обсуждение на общий случай. Далее мы будем вести рассмотрение, пользуясь примером.

Предположим, что у нас есть градиентное изображение, такое, как на рис. 7.3, на котором представлены простые геометрические тела в виде контуров, и мы хотели бы выяснить, имеется ли на этом изображении треугольник. (Треугольник указывает на присутствие клина.) Очень простой подход к решению этой задачи может заключаться в следующем: нужно построить эталон или трафарет, такой, например, как на рис. 7.12, и просматривать через него последовательно все изображение. Если мы найдем такую позицию, при которой «отверстие» в эталоне заполнено белым, можно будет сделать вывод, что в этом месте обнаружен треугольник. Сразу же возникает возражение против такой процедуры: любая достаточно большая сплошная область белого цвета может быть ошибочно принята за треугольник.

Эту трудность можно преодолеть, если искать не просто белую

область, заполняющую эталон, а белую треугольную область, окруженную черными областями. На рис. 7.13 показано схематически, как эту операцию можно выполнить с помощью некоторого эталона. При работе с новым эталоном мы будем считать, что треугольник обнаружен только в том случае, если каждая область эталона закрывает зону изображения, уровень полутонов которой соответствует эталонной разметке. Другими словами, области эталона, помеченные нулем, должны «регистрировать» только нулевые значения полутонов, а области, помеченные единицей,— только единичные значения. Заметим, что эталон на рис. 7.13 сам является бинарным изображением. (Для простоты мы не показали его разбиения на квад-

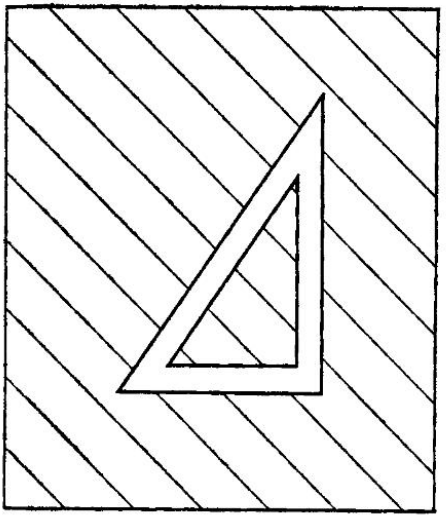


Рис. 7.12. Простой эталон.

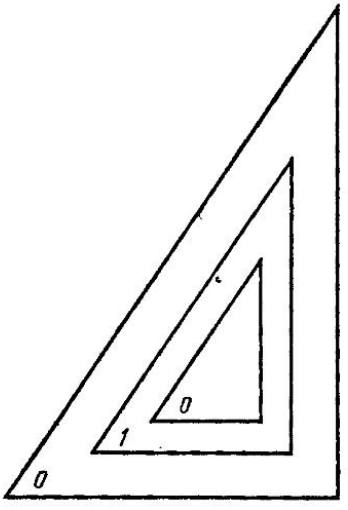


Рис. 7.13. Более совершенный эталон.

ратные элементы.) Размер эталона, однако, обычно меньше, чем размер исходного изображения, так как наша цель заключается в том, чтобы обнаружить присутствие некоторого «малого изображения» в пределах большого. Говоря языком математики, область определения эталоиа меньше, чем область определения исходного изображения.

На практике в большинстве случаев нельзя рассчитывать на полное совпадение с эталоном, рассмотренное выше. Более реальным подходом к решению этой проблемы было бы определение некоторой меры соответствия между частью изображения и эталоном. Одним из возможных определений является следующее:

Пусть $g(i, j)$ — наше дискретное изображение, $t(i, j)$ — эталон и D — область определения эталона. (Например, D — квадрат размером 20×20, а область определения изображения — квадрат размером 500×500.) Тогда меру соответствия между частью изображения и эталоном можно определить следующим образом:

$$M(m, n) = \sum_{\substack{\text{все } i, j, \text{ такие,} \\ \text{что точка} \\ (i-m,\ j-n) \\ \text{внутри } D}}\sum |g(i, j) - t(i-m, j-n)|. \qquad (1)$$

Заметим, что это определение сводится к сдвигу эталона $t(i, j)$ в положение (m, n) на изображении и к присвоению величине $M(m, n)$ значения, равного числу элементов, в которых уровни полутонов изображения и размещенного на нем эталона различны. В связи с тем что мы, по-видимому, хотим найти соответствие эталону где-то в пределах всего изображения, нам придется вычислять $M(m, n)$ для всех положений эталона (m, n) и фиксировать те позиции, для которых величина $M(m, n)$ мала.

Выделим теперь из предшествующего обсуждения основные элементы процедуры сравнения с эталоном. Используя понятие функции интенсивности, эту процедуру можно сформулировать следующим образом: мы ищем такую область плоскости изображения, в которой функция интенсивности сходна с некоторой заранее заданной функцией интенсивности, называемой эталоном. Следовательно, нам в общем случае необходимо средство для определения сходства или расстояния между двумя функциями интенсивности, и здесь оказывается полезным понятие о метрике. В данный момент нет необходимости приводить формальное определение класса функций, задающих метрику; заметим лишь, что здесь подразумевается обычное обобщение понятия евклидова расстояния. Наша функция $M(m, n)$ в формуле (1) удовлетворяет этому определению и иногда называется метрикой L^1. Приведем здесь еще две метрики:

$$E(m, n) = \left\{\sum_i\sum_j [g(i, j) - t(i-m, j-n)]^2\right\}^{1/2} \qquad (2)$$

и

$$S(m, n) = \max_{i, j} |g(i, j) - t(i-m, j-n)|, \qquad (3)$$

где в каждом случае область изменения i и j та же, что и в формуле (1). Формула (2) задает обычное евклидово расстояние между двумя векторами. Определение (3) иногда называется метрикой L^∞. Заметим, что эти определения относятся не только к бинарным изображениям, хотя, как мы видели выше, определение метрики может иметь особенно простую интерпретацию, если ограничиться бинарными изображениями.

Исследуем определение (2) более подробно. Часто бывает удобно убрать квадратный корень, приняв, что мера расстояния должна

быть $E^2(m, n)$. Если мы сделаем это и возведем разность в квадрат, то получим

$$E^2(m, n) = \sum_i \sum_j [g^2(i, j) - 2g(i, j)\, t(i-m, j-n) + t^2(i-m, j-n)],$$

где, как обычно, суммирование проводится по всем i и j, таким, что аргументы функции t остаются внутри области ее определения. Теперь видно, что при перемещении эталона по всему изображению путем изменения m и n результат суммирования для последнего члена остается неизменным, так как при любых значениях m и n область аргументов для t^2 совпадает с областью определения функции t. Результат суммирования для первого члена — *энергия изображения* в пределах окна,— вообще говоря, изменяется с изменением m и n, так как эти величины определяют область возможных значений для i и j. Положим на какое-то время, что эти изменения в энергии изображения достаточно малы и ими можно пренебречь. Тогда величина $E^2(m, n)$ становится малой, когда сумма $\sum_i \sum_j g(i, j)\, t(i-m, j-n)$ возрастает. В соответствии с этим определим *функцию взаимной корреляции* $R_{gt}(m, n)$ между двумя функциями g и t следующей формулой:

$$R_{gt}(m, n) = \sum_i \sum_j g(i, j)\, t(i-m, j-n), \tag{4}$$

где, как всегда, мы суммируем по всем i и j внутри области, занимаемой передвинутым эталоном. Можно использовать это определение как меру сходства между эталоном и областью изображения вблизи точки (m, n); эталон и изображение считаются похожими, если взаимная корреляция велика. Конечно, если мы поместим эталон в белую область изображения, взаимная корреляция будет иметь значительную величину. Другими словами, наше первоначальное предположение о независимости суммы $\sum_i \sum_j g^2(i, j)$ от точки (m, n) совершенно не обосновано. Возможной альтернативой к вычислению функции E^2 является вычисление *нормированной функции взаимной корреляции* $N_{gt}(m, n)$ по формуле

$$N_{gt}(m, n) = \frac{1}{\left[\sum_i \sum_j g(i, j)^2\right]^{1/2}} R_{gt}(m, n),$$

где мы накладываем обычные ограничения на область значений i и j. Согласно неравенству Коши — Шварца,

$$N_{gt}(m, n) \leqslant \left[\sum_i \sum_j t(i-m, j-n)^2\right]^{1/2}, \tag{5}$$

причем равенство имеет место в том и только том случае, когда функция интенсивности в интересующей нас области пропорциональна

эталонной функции. Следовательно, нормированная функция взаимной корреляции принимает максимальное значение, когда соответствие эталона и функции интенсивности абсолютное (с точностью до масштабного коэффициента). С другой стороны, при некоторых условиях наше предположение относительно суммы $\Sigma\Sigma g^2$ выполняется в точности. Например, предположим, что у нас имеется бинарное изображение, и пусть белое соответствует 1, черное соответствует —1, но не нулю, как обычно. Тогда сумма квадратов значений функции интенсивности по любой области фиксированного размера постоянна, и взаимная корреляция имеет максимальное значение именно тогда, когда функция E^2 минимальна. Использование взаимной корреляции в качестве критерия сходства имеет также свои корни в некоторых похожих, но не идентичных задачах классификации образов и обнаружения сигналов. Взаимную корреляцию до сих пор еще часто применяют, возможно, потому, что известно много случаев ее эффективной реализации. Как мы убедились, однако, использование взаимной корреляции для сравнения с эталоном влечет за собой неявное предположение о том, что энергия функции интенсивности внутри любого окна приблизительно одна и та же.

Рассмотрим снова наш исходный пример — задачу обнаружения местонахождения треугольника на рис. 7.3. Предположив, что мы уже приняли одно из определений расстояния в качестве меры сходства, мы все-таки должны еще спроектировать сам эталон. После некоторого размышления придем к заключению, что эта проблема в том виде, в каком она поставлена, может быть решена только с помощью целого набора эталонов. Клин, например, если нет каких-либо явных ограничений, может находиться в любом месте сцены и может быть виден под любым углом. Следовательно, видимый размер его треугольной грани будет колебаться в широких пределах и кажущаяся величина его внутренних углов также может быть самой разной. Для каждого такого положения клина нам, очевидно, необходим отдельный эталон, и в связи с тем, что каждый эталон нужно перемещать по всей сцене, объем вычислений будет, по-видимому, большим. В такой ситуации естественным подходом к решению этой задачи является замена *глобального* эталона набором *локальных* эталонов. Локальные эталоны проектируются таким образом, что они соответствуют различным частям интересующего нас объекта. Основной довод в пользу этого разделения заключается в том, что отдельные части меняются по своему виду меньше, чем целый объект.

В нашем примере с треугольником мы можем сначала поискать три отдельные линии и затем уже подумать над тем, как выяснить, когда три прямые образуют треугольник. Этот подход является разумным по отношению к большому классу проблем, отличительным признаком которых является сильная изменчивость внешнего

вида интересующего нас объекта. С другой стороны, существуют некоторые задачи классификации образов, которые можно так ограничить или стилизовать, чтобы была уверенность в том, что каждый образ всегда будет появляться изолированно от других и иметь один и тот же размер и одинаковую ориентацию. При решении таких простых задач иногда оказывается целесообразно построить один эталон, соответствующий образу как целому. Другими словами, выбор локального или глобального эталона диктуется главным образом ожидаемой изменчивостью в обрабатываемых изображениях.

Сравнение с эталоном применяется во многих внешне различных но, по существу, эквивалентных формах. Выбор формы в конечном счете определяется соображениями удобства и эффективности. В качестве простого примера предположим, что мы хотим обнаружить наличие вертикального края. Мы могли бы использовать «бинарный» эталон (подобный эталону на рис. 7.13, но в форме одной вертикальной линии) и применять его к градиентному изображению. С другой стороны, можно было бы легко придумать эталон, соответствующий по форме вертикальной линии на исходном изображении. (На самом деле, если бы мы оперировали с исходным изображением, мы, возможно, захотели бы использовать два эталона: один для переходов «темное — светлое» и другой для переходов «светлое — темное». Если мы работаем с градиентным изображением, этот связанный с симметрией вопрос не возникает, потому что мы обычно берем модуль градиента.) На рис. 7.14 показан эталон, который будет обнаруживать переходы слева направо от темного к светлому вдоль вертикальной линии, если для определения сходства использовать формулу (1). Область эталона, отмеченная словом «низкая», имела бы при этом значения интенсивности, соответствующие темному концу полутоновой шкалы, а область с пометкой «высокая» — светлому. Трудность, которая может возникнуть при использовании этого эталона, заключается в том, что он не инвариантен к абсолютным значениям уровня полутонов; добавление константы к значениям полутонов изменит степень соответствия. Это соображение может привести нас к процедуре, в которой областям эталона, отмеченным словами «низкая» и «высокая», приписаны значения -1 и $+1$ соответственно, а в качестве меры сходства используется корреляция, вычисляемая по формуле (4). Такая процедура эквивалентна вычитанию элементов из смежных столбцов и сумми-

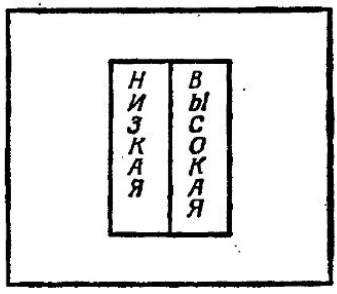


Рис. 7.14. Эталон для вертикальных краев.

рованию разностей. Другими словами, процедура отыскивает различия в уровне полутонов вдоль вертикальной линии, а это почти равнозначно использованию бинарного эталона на градиентном изображении.

Следует заметить, что важным аспектом методов сравнения с эталоном независимо от того, выполняется ли сравнение на исходном изображении или на его обработанном варианте, является то, что при сравнении используется только локальная информация. Если мы пытаемся выяснить, скажем, имеется ли вертикальная линия в данной области изображения, единственное, что повлияет на наше решение,— это набор значений интенсивности в этой области. Эта локальность придает методам сравнения с эталоном их привлекательную простоту и одновременно служит источником их наиболее существенных ограничений.

7.5.2. СРАВНЕНИЕ С ЭТАЛОНОМ — СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

Некоторые разновидности методов сравнения с эталоном можно интерпретировать в рамках теории статистических решений, развитой в ч. I. Продемонстрируем такую интерпретацию с помощью простого примера.

Предположим, что у нас есть бинарное изображение $g(i, j)$, и пусть нам известно, что оно должно соответствовать одной из двух возможных идеальных сцен, скажем $r(i, j)$ или $s(i, j)$. Реальное изображение g, однако, является только несовершенным представлением идеальной сцены. Предположим, что с вероятностью $p > 1/2$ произвольный элемент изображения g имеет величину, определяемую идеальной сценой, которую представляет изображение g. Если эти вероятности для всех элементов независимы, мы легко можем записать вероятности появления изображения g при условии, что либо r, либо s является для него исходной идеальной сценой. А именно если обозначить символами ω_r и ω_s события, состоящие в том, что идеальной сценой оказывается соответственно $r(i, j)$ и $s(i, j)$, то мы получим

$$P(g \mid \omega_r) = \prod_{i, j} p^{1 - |g(i, j) - r(i, j)|} (1 - p)^{|g(i, j) - r(i, j)|} \qquad (6)$$

и

$$P(g \mid \omega_s) = \prod_{i, j} p^{1 - |g(i, j) - s(i, j)|} (1 - p)^{|g(i, j) - s(i, j)|}. \qquad (7)$$

Заметим, что в этих уравнениях показатели степени при p равны единице, если идеальное и реальное изображения имеют одно и то же значение в данной точке (i, j), и равны нулю, если эти значения разные; наоборот, показатели степени при $(1-p)$ равны единице, если идеальное и реальное изображения в данной точке (i, j) различны.

Предположим теперь, что мы хотим установить, представляет изображение g сцену r или сцену s. Мы знаем из гл. 2, что по правилу классификации, дающему минимальную вероятность ошибок, нужно вычислять апостериорные вероятности $P(\omega_r|g)$ и $P(\omega_s|g)$ и выбирать то событие (ω_r или ω_s), для которого апостериорная вероятность больше. Если допустить для простоты, что априорные вероятности появления этих двух сцен равны, это правило, как мы знаем, будет эквивалентно правилу, отбирающему класс, для которого условная вероятность больше. Как и в предыдущих главах, мы можем упростить дело, выбирая класс, для которого максимален логарифм условной вероятности. Таким образом, из (6) и (7) получаем, что необходимо вычислить

$$\log P(g|\omega_r) = \left[\log\left(\frac{1-p}{p}\right)\right] \sum_{i,j} |g(i,j) - r(i,j)| + \sum_{i,j} \log p \quad (8)$$

и

$$\log P(g|\omega_s) = \left[\log\left(\frac{1-p}{p}\right)\right] \sum_{i,j} |g(i,j) - s(i,j)| + \sum_{i,j} \log p. \quad (9)$$

Заметим теперь, что $\log[(1-p)/p]$ отрицателен, так как мы задали $p > 1/2$; кроме того, последние члены в (8) и (9) одинаковы. Следовательно, правило классификации изображения g, дающее минимальную вероятность ошибок, выбирает событие ω_r, если

$$\sum_{i,j} |g(i,j) - r(i,j)| < \sum_{i,j} |g(i,j) - s(i,j)|, \quad (10)$$

и событие ω_s в противном случае. Таким образом, мы видим, что в этом примере наши статистические предположения приводят к правилу минимальной вероятности ошибки, которое в точности эквивалентно методу сравнения с эталоном на основе меры сходства, определяемой формулой (1). Как и следовало ожидать из интуитивных соображений, идеальные изображения r и s — это эталоны.

В предыдущем примере есть несколько моментов, о которых следует упомянуть. Во-первых, пусть, например, нам известно, что изображение g на самом деле может не соответствовать ни r, ни s, т. е. мы хотим допустить также возможность отказа рассматривать изображение g в дополнение к возможностям классифицировать его как сцену r или как сцену s. Это уточнение также может быть проанализировано в статистических терминах. На практике, однако, более обычный прием — это установка порога для меры сходства с эталоном. Если полученное наилучшее сходство не достигает порога, изображение g отбраковывается, т. е. принимается решение, что g не соответствует никакой из исходных идеальных сцен.

Выше обсуждалась другая типичная ситуация. Часто интересующая нас идеальная сцена является только частью изображения g.

В этом случае эталоны определяются на областях, меньших, чем область g, и перемещаются по всему изображению. Каждое положение эталона ставит перед нами новую задачу классификации, которая, по крайней мере в принципе, может исследоваться тем же методом, что и наша иллюстративная задача.

Применение формальных статистических методов классификации к проблемам выделения объектов на изображении оказалось на практике весьма сложным делом. Одна из основных трудностей заключается в выборе полезных статистических предположений. В качестве примера рассмотрим только что упомянутую задачу перемещения эталона по картинке с целью обнаружения объекта. Предположим, что хорошее сходство с эталоном имело место в двух его позициях, разделенных только одним элементом изображения. Конечно, из этого не следует, что были найдены два отдельных объекта: скорее всего, оба положения эталона соответствуют одному и тому же объекту на изображении. Формально этот эффект можно описать, вводя статистические связи между элементами. На практике, однако, обычно гораздо проще разработать для таких случаев специальные процедуры с целью обойти эти трудности, а не преодолевать их с помощью формальных аналитических приемов. Тем не менее статистический подход при разработке процедур сравнения с эталоном обеспечивает если и не универсальные рецепты, то достаточно хорошее руководство.

7.6. АНАЛИЗ ОБЛАСТЕЙ

7.6.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

В предыдущем разделе мы обсуждали способы упрощения изображения путем подчеркивания или выделения контуров. Теперь обратимся к методу, который в определенном смысле является дополнительным к рассмотренным ранее. Сущность этого метода, называемого *анализом областей*, заключается в попытке упростить дискретное изображение путем его разбиения на множество отдельных областей. В простейшем случае каждая область составлена из связанных между собой элементов изображения с одним и тем же уровнем полутонов. Отсюда, прежде чем перейти к дальнейшему, мы должны предварительно договориться о том, когда два элемента изображения следует считать связанными. В частности, надо определить, считать ли каждый элемент связаиным со всеми восемью окружающими его элементами (8-связка) или он связан только с теми четырьмя, которые имеют с ним общую сторону (4-связка).

Чтобы показать сложность этого вопроса, рассмотрим простое бинарное изображение на рис. 7.15, на котором непомеченные элементы представляют собой нули и соответствуют фону. Пусть мы

первоначально определили, что соединения элементов будут в смысле 8-связок. Тогда, поскольку элементы, имеющие хотя бы только одну общую вершину, связаны, наш объект в целом считается связным. Однако в силу того же рассуждения здесь фон также оказывается связным — «отверстие» в объекте не отделено от окружающего его фона. Следовательно, мы оказались в довольно неприятной ситуации: мы вынуждены иметь дело со связным объектом в виде оболочки, не имеющей внутренности. Предположим поэтому, что в качестве определения мы используем 4-связки. Тогда наш объект несвязный, но и фон, однако, тоже. Следовательно, мы находимся в столь же странном положении, поскольку у нас есть несвязный объект с четко выделенной внутренней областью. Такая ситуация отражает основное свойство сетки квадратных элементов. Не останавливаясь на обосновании, в определениях будем использовать 4-связки. В будущем, когда будем говорить о связных или смежных элементах, будем иметь в виду связность в этом смысле. (Заметим, что сетка шестиугольных элементов свободна от этого недостатка, так как любые два шестиугольных элемента с общей вершиной имеют также и общую сторону.)

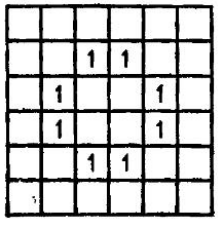


Рис. 7.15. Связность на сетке квадратных элементов.

Определив понятие связности, вернемся к вопросу об анализе изображения путем разбиения его на области. Будем называть мно-

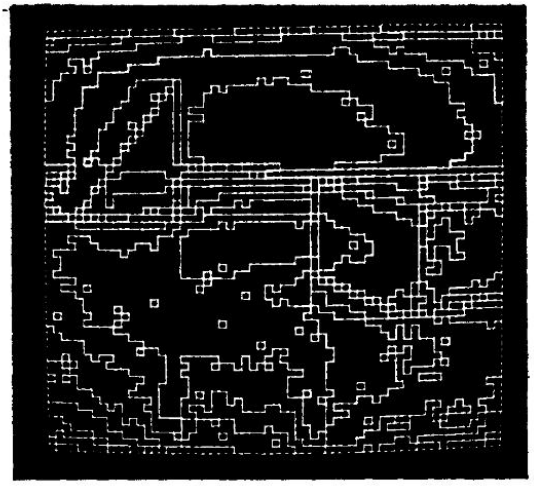


Рис. 7.16. Элементарные связные области для рис. 7.2. (Воспроизводится с разрешения Клода Феннема.)

жество R элементов изображения *элементарной связной областью*, если:

1) Все элементы в R имеют одинаковый уровень полутонов.

2) Любые два элемента в R соединены цепочкой смежных элементов, каждый из которых принадлежит R.

3) Любое множество элементов, целиком содержащее R и не совпадающее с ним, не удовлетворяет обоим предыдущим условиям.

Второе условие может быть взято за определение *связной области*. Третье условие гарантирует, что элементарные области настолько велики, насколько это возможно. На рис. 7.16 изображены элементарные связные области дискретного изображения, показанного на рис. 7.2. Алгоритм, по которому созданы границы между этими областями, просто провел линию между каждыми двумя смежными

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	4	4	4	5	6	6	6	1	1
1	1	4	4	4	5	6	6	6	1	1
1	1	4	4	4	5	7	7	7	1	1
1	1	8	8	8	8	7	7	7	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Рис. 7.17. Пример определения областей с допуском 1.

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	4	4	4	5	6	6	6	1	1
1	1	4	4	4	5	6	6	6	1	1
1	1	4	4	4	5	7	7	7	1	1
1	1	8	8	8	8	7	7	7	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Рис. 7.18. Пример элементарных связных областей.

элементами, имеющими различные значения полутонов. (Для разборчивости мы укрупнили первоначальную сетку разбиения размером 120×120 до размера 60×60.) Заметим, что эти элементарные области наряду с «существенными» областями, соответствующими поверхностям геометрических объектов, выявляют легкие изменения в тенях и световых переходах, что обычно нежелательно. Существуют по крайней мере два способа борьбы с этими явлениями: путем ослабления первого условия или путем слияния областей. В первом случае мы переводим два смежных элемента в одну элементарную область, если разность их уровней полутонов меньше, чем точно установленный порог. На рис. 7.17 показан простой пример, где разрешено отклонение в один полутоновый уровень. Линия между смежными элементами проводится только в том случае, если разность их полутоновых уровней строго больше единицы. В результате появляется «отросток» границы в пределах одной из областей. Более серьезно то, что у нас смежные элементы со значениями 4 и 8 оказались в пределах одной области. В общем случае эта процедура разрешает помещать смежные элементы с произволь-

но различными уровнями полутонов в одну область. В качестве альтернативы мы могли бы образовать элементарные связные области, как мы их определили первоначально, а затем использовать некоторый критерий при решении вопроса о том, когда соединять две области, имеющие общую границу. Например, предположим, что мы решили объединить две смежные области, если средняя разность значений уровня полутонов для элементов по разные стороны их общей границы меньше или равна единице. Как показано на рис. 7. 18, в результате сольются области со значениями элементов 4 и 5, а также области со значениями 7 и 8. Область со значением 6 будет объединена с областью значений либо 5, либо 7 в зависимости от

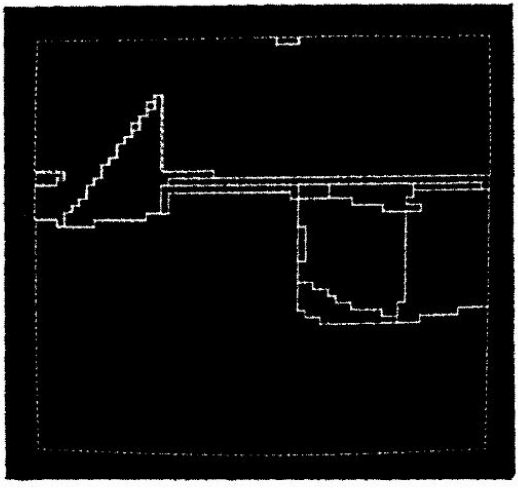


Рис. 7.19. Вариант изображения рис. 7.16 после слияния областей. (Воспроизводится с разрешения Клода Феинема.)

порядка, в котором рассматриваются границы областей. Кроме того, область со значениями 4 или же со значениями 8 (в зависимости от порядка рассмотрения областей) не будет объединена ни с какими другими областями. Следовательно, результат зависит от конкретной реализации алгоритма, но в любом случае область со значениями 8 не будет объединяться с областями значений 4 и 5.

Нетрудно построить и другие критерии как для первоначального выделения, так и для слияния областей. В качестве примера рассмотрим следующий алгоритм объединения. Пусть R_1 и R_2— две области с общей границей, и пусть периметры этих областей равны P_1 и P_2. Пусть L — длина части общей границы, разделяющей элементы, полутоновые уровни которых отличаются меньше, чем на

d. Мы объединяем две области, если для данного порога t

$$\max\left\{\frac{L}{P_1}, \frac{L}{P_2}\right\} \geqslant t.$$

Одна из интерпретаций такого алгоритма состоит в следующем. Мы можем считать, что L — подозрительная часть общей границы. Если одна из этих областей, скажем R_2, более или менее окружена областью R_1, то общая граница составит значительную часть от P_2. Далее, если эта общая граница вызывает сомнения, то величина L также окажется значительной частью периметра P_2, и области будут объединены. Следовательно, алгоритм будет стремиться придать R_1 более правильную форму во всех случаях, когда это можно сделать, не игнорируя хорошо определенные границы. На рис. 7.19 показан результат обработки рис. 7.16 с помощью этого алгоритма при $d=2$ и $t=0{,}45$.

7.6.2. ОБОБЩЕНИЯ

Можно расширить основные понятия анализа областей, чтобы, кроме интенсивности, включить в анализ и другие характеристики изображений. Одной из наиболее интересных возможностей является разбиение изображения на области в соответствии с цветом. Для того чтобы рассмотреть эту возможность, нужно расширить определение функции интенсивности таким образом, чтобы включить в него цветовую информацию. Сделаем это, воспользовавшись тем, что пространство всех возможных цветов может быть представлено в виде трехмерного векторного пространства. Этот факт, в основе которого лежат скорее физиологические, чем физические данные, приводит нас к мысли определить функцию интенсивности как векторную функцию $\mathbf{g}(x, y)=[g_1(x, y), g_2(x, y), g_3(x, y)]$, где g_1, g_2 и g_3 — координаты цвета изображения в точке (x, y)[1]). Параметры цветового пространства могут, вообще говоря, выбираться многими способами; поэтому для полного определения функции интенсивности мы должны еще задать базисные векторы. Возможным базисом является набор трех «первичных» цветов: красного, зеленого и синего. Физически использование этого базиса соответствует получению трех (скалярных) изображений одной и той же сцены последовательно с помощью красного, зеленого и синего фильтров. Три компоненты функции интенсивности в этом базисе называются соответственно красной, зеленой и синей *цветовыми составляющими* и будут обозначаться далее соответственно как $g_R(x, y)$, $g_G(x, y)$ и $g_B(x, y)$.

[1]) Это понятие в свою очередь может быть расширено до понятия обобщенной векторной функции интенсивности, которая включает в качестве координат дальность, текстуру и т. д.

Анализ областей можно начать с образования элементарных связных областей, составленных из элементов изображения, у которых красная, зеленая и синяя координаты одинаковы. Затем области могут быть объединены согласно некоторому критерию, аналогичному критериям, описанным для черно-белых изображений. Например, мы можем объединить две области, у которых значения g_R, g_G и g_B близки. Особенный интерес представлял бы критерий, который позволил бы объединить две смежные области, имеющие

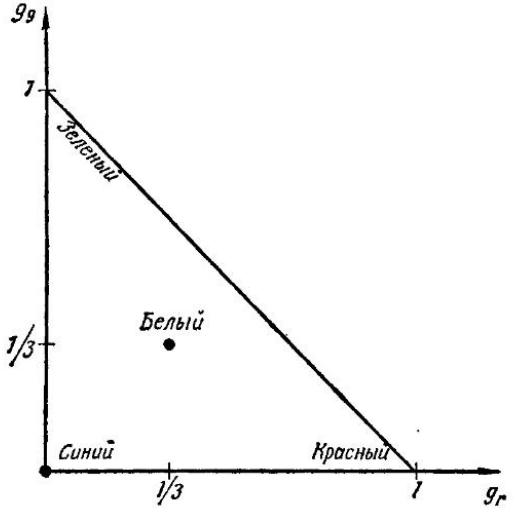


Рис. 7.20. Нормированные цветовые координаты.

различные интенсивности, но один и тот же оттенок. Этот критерий был бы удобен, если бы мы хотели, чтобы на анализ не влияли изменения освещенности или наличие теней. С этой целью определим *нормированные цветовые координаты* точки изображения следующим образом (не указывая зависимости от x и y):

$$g_r = \frac{g_R}{g_R + g_G + g_B},$$

$$g_g = \frac{g_G}{g_R + g_G + g_B},$$

$$g_b = \frac{g_B}{g_R + g_G + g_B}.$$

Так как эти три числа (называемые также хроматическими координатами или трихроматическими коэффициентами) в сумме дают единицу, мы можем взять любые два из них, скажем g_r и g_g, и этого будет достаточно для того, чтобы определить нормированные цветовые координаты в некоторой точке на изображении. На рис. 7.20

показано возможное представление двумерного нормированного пространства цветов. Любой измеряемый нами нормированный цвет будет попадать внутрь треугольника; «чистые» красный, зеленый и синий цвета окажутся около вершин. Заметим, что нормировка цветов равнозначна изменению базиса трехмерного цветового пространства от первоначальных красной, зеленой и синей координат к нормированной красной, нормированной зеленой и общей интенсивности.

Анализ областей, основанный на нормированных цветах, не будет (в идеальном случае) чувствителен к изменениям интенсивности, но в то же время он будет чувствителен к изменениям того, что мы неточно называем «цветом». Например, предположим, что у нас имеется изображение, содержащее среди других объектов желтую поверхность; предположим далее, что поверхность частично находится в тени. В идеальном случае [1]) анализ областей, при котором в качестве входной информации используется двумерная векторная функция интенсивности с нормированными цветами $[g_r(x, y), g_g(x, y)]$, смог бы выделить всю желтую поверхность как единую область. В то же время анализ, основанный на использовании только скалярной функции интенсивности черно-белого изображения, по-видимому, разделил бы эту поверхность по линии тени на две области.

Здесь следует отметить, что, хотя мы и ввели цвет в качестве одного из средств анализа областей, совершенно очевидна возможность использования цвета и в других методах, которые мы обсуждали ранее. Например, можно оценивать градиент отдельно по каждой компоненте векторной функции интенсивности и затем суммировать значения модулей оценок. Этот процесс подчеркнул бы границы между областями различных цветов даже в том случае, когда области на черно-белом изображении имеют одинаковую яркость. Точно так же можно изменить и алгоритмы сравнения с эталоном, чтобы они могли использовать дополнительную информацию, содержащуюся в векторной функции интенсивности.

7.7. ПРОСЛЕЖИВАНИЕ КОНТУРОВ

В работах по анализу сцен очень часто повторяется утверждение, что изображение можно упростить, представив объекты на нем в контурной форме. Ранее мы рассматривали применение градиентных операторов; другой разработанный для этой же цели метод на-

[1]) Изучение цвета — это сложный вопрос, так как цвет представляет собой в конечном счете скорее физиологическое явление или феномен восприятия, чем чисто физический эффект, связанный только с энергией и частотой электромагнитных волн. Кроме того, здесь существуют трудности технического порядка при выполнении расчетов, основанных на небольших различиях в измеренных значениях.

зывается *прослеживанием контуров*. Метод, как можно понять по названию, заключается в последовательном вычерчивании границы между объектом и фоном. Допустим сначала, что мы имеем дело с аналоговыми изображениями, на которых могут быть только два уровня полутонов. Это предположение дает нам возможность игнорировать на некоторое время проблему отделения объекта от фона. Опишем на примере один из простейших алгоритмов прослеживания контуров. Представьте себе прослеживающую точку в виде «жука», который ползает по изображению до тех пор, пока не наталкивается на темную область (т. е. на объект). Тогда он поворачивает влево и движется по кривой, пока не выйдет за пределы объекта; после этого он начинает немедленно поворачивать вправо. Повторяя этот процесс, «жук» будет прослеживать границу объекта по часовой стрелке до тех пор, пока не попадет в окрестность начальной точки. Последовательность точек перехода между объектом и фоном может быть использована для описания контура. Этот процесс показан на рис. 7.21. Мы сразу же можем отметить некоторые свойства этого алгоритма. Во-первых, радиус кривизны траектории «жука» определяет «разрешающую способность» алгоритма прослеживания контуров. «Жук», очевидно, не сможет выделить острые изгибы коитуров, кривизна которых сравнима с кривизной траектории. Далее, если в силуэте объекта имеются «отверстия» рядом с самой границей, «жук» может попасть в «отверстие», из-за чего возникнут ошибочные точки перехода. И наконец, алгоритм в таком его виде не вполне определен, так как способ построения центров каждой криволинейной части траектории не был задан.

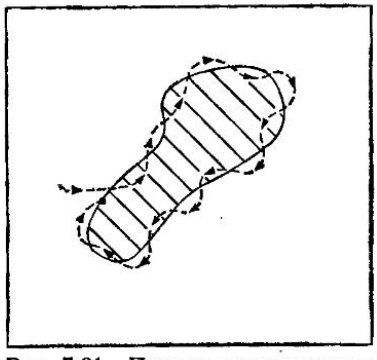


Рис. 7.21. Пример прослеживания контура для объекта, заданного в аналоговой форме.

Один из упомянутых выше недостатков исчезает, когда мы имеем дело с бинарными дискретными изображениями. В частности, дискретный вариант алгоритма может быть просто и точно определен следующим образом.

Просматривайте изображение до тех пор, пока не встретится элемент объекта. Затем руководствуйтесь следующими правилами: если вы находитесь на элементе объекта, поверните налево и сделайте шаг; если вы находитесь на элементе фона, поверните направо и сделайте шаг. Прекратите продвижение, если вы находитесь в пределах одного элемента от начальной точки.

На рис. 7.22 показано действие этого алгоритма на простом бинарном изображении. Заметим, что «жук» никогда не проникает в

верхний элемент объекта, соединенный в смысле 8-связок с его остальной частью. Было бы приятно, если бы мы могли констатировать, что алгоритм «знает» о 4- и 8-связках и при определении множества элементов объекта, связанных с тем элементом, с которого начиналось прослеживание, использует 4-связки. К сожалению, это не так. «Жук» мог бы проникнуть в этот элемент, примыкающий в смысле 8-связок, если бы он вошел в элемент с координатами (4, 5) снизу, а не сбоку. Таким образом, последовательность переходных точек, выделяемых алгоритмом, зависит от правила первоначального просмотра изображения. «Отверстие» в объекте, соединенное в смысле 8-связок с фоном, точно так же создало бы неопределенность в выборе последовательности переходных точек, выделяемых алгоритмом. Этот недостаток представляет собой результат крайней простоты алгоритма. Характерно, что в каждой точке при выборе, в какую сторону повернуть, используются только три бита информации: два бита сообщают, с какого направления точка прослеживания проникла в элемент, и третий бит определяет, принадлежит элемент объекту или фону. Могут быть построены и другие алгоритмы прослеживания контуров, в которых не возникает проблем из-за асимметрии и неопределенности, присущих описанному варианту. Эти более тщательно разработанные алгоритмы основаны на просмотре элементов в окрестности текущего положения «жука», и поэтому они требуют большего времени для вычислений.

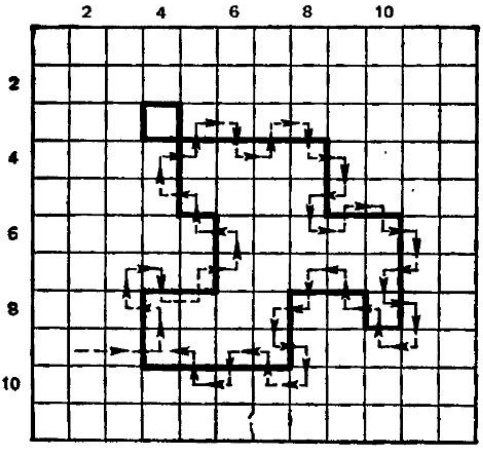


Рис. 7.22. Пример прослеживания контура для объекта, заданного в дискретной форме.

Существуют два важных условия, которые должны быть выполнены для того, чтобы алгоритм прослеживания контуров успешно работал. Во-первых, поскольку функция интенсивности обычно имеет много полутоновых уровней, должен существовать какой-то способ выделения объекта, контур которого необходимо прослеживать. В простых случаях объект может быть отделен от фона с помощью соответствующей пороговой обработки изображения. Мы можем просто считать объектом все, что на изображении темнее (или светлее) некоторой установленной величины. Этот прием приводит нас к варианту с бинарным изображением, описанному выше. В тех слу-

чаях, когда это не может быть сделано, иногда оказывается возможным прослеживать контур, выделяя его локально по большим перепадам полутонового уровня между объектом и фоном. В некоторых алгоритмах для этой цели объединяют оператор оценки градиента и процедуру прослеживания контуров. Оператор оценки градиента отыскивает локальное направление контура (при условии, что на контуре уже найдена какая-то точка, с которой необходимо начать), определяя для этой цели направление наиболее заметного края вблизи заданной контурной точки. Предполагается, что небольшой шаг, сделанный в найденном направлении, даст новую точку около границы объекта. Чтобы обнаружить перепад интенсивности вблизи этой точки, снова вызывается оператор оценки градиента, и далее процесс повторяется.

Второй важной предпосылкой для успешного прослеживания контуров является отсутствие ложных разрывов в силуэте объекта. Даже в простом случае бинарных дискретных изображений алгоритм прослеживания контуров может случайно «попасть внутрь объекта». Это представляет серьезную проблему, когда методы прослеживания контуров используются при опознавании «печатных» букв и цифр, написанных человеком от руки. Если, например, петля у цифры «6» будет не совсем закончена, алгоритм прослеживания контуров даст на выходе информацию, существенно отличающуюся от желаемой. Такие трудности можно иногда преодолеть с помощью предварительного сглаживания изображения, позволяющего заполнить небольшие зазоры.

Заметим, что прослеживание контуров — существенно последовательный процесс. Ошибка, допущенная на любом шаге этого процесса, делает более вероятными ошибки и на последующих шагах. Это качество составляет контраст с такими операциями, как, например, сравнение с эталоном, которые могут осуществляться в параллель. В последнем случае неудача при попытке обнаружить сходство в одной части изображения не оказывает прямого влияния на результат в другой части изображения. Представляется в связи с этим, что алгоритмы прослеживания контуров могут применяться только на изображениях с низким уровнем шума.

7.8. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Можно указать очень немного работ общего характера по автоматическому анализу сцен. Единственная монография, посвященная специально этому вопросу, принадлежит Розенфельду (1969). Хорошие сборники работ были изданы Фишером и др. (1962), Типпетом и др. (1965), Уром (1966), Кеналом (1968), Ченгом и др. (1968), Колерсом и Иденом (1968), Граселли (1969), Ватанабе (1969), а также Липкином и Розенфельдом (1970). Другим полезным сбор-

ником трудов является «Специальный выпуск по выделению и отбору признаков при распознавании образов» [1]).

Мы не будем уделять большого внимания ни проблеме улучшения качества изображений для последующей интерпретации их человеком, ни проблеме кодирования изображений для их более эффективной передачи и хранения. Обзор по этим вопросам написан Хуангом и др. (1971); он снабжен большим списком литературы.

Большая часть тех идей, которые обсуждались в этой главе, была выдвинута на ранней стадии исследований, когда «анализ сцен» состоял почти исключительно из опознавания знаков. Далее мы ссылаемся на некоторые наиболее представительные источники этих идей, причем наши ссылки подбирались по принципу ясности и разносторонности изложения, а не по принципу приоритета.

Проблема представления изображений в ЭВМ состоит из двух частей: должны быть выбраны способы как амплитудной, так и пространственной дискретизации. Проблема амплитудного квантования для общего случая была решена путем обращения к физиологическим аналогиям. В работе Грегори (1966) содержится изложенный в доступной форме обзор по этому вопросу; более исчерпывающе эта проблема освещена Грэхемом и др. (1965). Работа Корнсвита (1970) содержит обширные сведения о системе зрительного восприятия человека. Проблема пространственного квантования решалась почти всегда путем дискретизации изображения с помощью сетки квадратных элементов. Ченг и Ледли (1968), а также Симон и Гюйо (1971) исследуют этот процесс аналитически, рассматривая его с точки зрения теории аппроксимации. (Другой аналитический подход — преобразование Фурье — будет обсуждаться в следующей главе.) Топологические преимущества гексагональной сетки в сравнении с квадратной сеткой рассматривались во многих работах, но немногие авторы действительно их использовали. Голэй (1969) предложил конструкцию вычислительного устройства параллельного действия, способного осуществлять ряд интересных операций над изображениями, представленными в виде массивов гексагональных элементов. Ингрэм и Престон (1970) впоследствии использовали его методы для обработки изображений кровяных телец.

Взаимно дополнительные операции пространственного дифференцирования и пространственного сглаживания появились в литературе по опознаванию знаков еще в работе Диннина (1955). Дойль (1960) применил логическое усреднение в тех же задачах. Градиентные операторы использовались на предварительных стадиях в обработке изображений трехмерных сцен Робертсом (1965) и Форсеном (1968). Кенал и Рендал (1964) применили аппроксимацию лапласиана функции интенсивности для подчеркивания перепадов полутонового уровня. Ярбус (1965) представил интересные психо-

[1]) *IEEE Transactions on Computers*, **20**, № 9 (September 1971).

физические доказательства важности краев с помощью регистрации движений глаза при рассматривании изображения человеком.

Задача сравнения с эталоном возникает в той или иной форме во многих работах, посвященных анализу зрительных сцен. Хайлиман (1961) использовал глобальные эталоны для распознавания «печатных» букв и цифр, написанных от руки. Мансон (1968) использовал локальные эталоны для той же цели. Кенал и Рендал (1964) применяли эталоны для обнаружения признаков объектов на аэрофотографиях. Робертс (1965) использовал локальные эталоны, чтобы обнаруживать короткие сегменты прямых линий. Гриффит (1971) взял вероятностную модель за основу при проектировании детектора линий. Розенфельд и Тэрстон (1971) использовали семейство эталонов для обнаружения переходов текстуры. Барни и Сильверман (1972) обсуждают семейство эффективных алгоритмов сравнения с эталоном. И наконец, классическая работа Хьюбеля и Визеля, итог которой был подведен Хьюбелем (1963), показала, что зрительный аппарат кошки при обнаружении сегментов прямых линий действительно выполняет действия, эквивалентные локальному сравнению с эталоном.

Разбиение сцены в процессе анализа областей — это уже более поздний метод по сравнению с другими обсуждавшимися в этой главе. Гузман (1968) анализировал идеальные контурные рисунки путем группировки областей, принадлежащих одному трехмерному объекту. Брайс и Феннема (1970) разработали методы выделения существенных областей прямо на дискретном изображении; разд. 7.5 (гл.7) в основном написан по материалу их работы. Хэрэлик и Келли (1969) использовали для разбиения изображения на области кластерный анализ. Можно упомянуть здесь, что характеристики текстуры изображений также были предложены в качестве средства для выделения областей. Гибсон (1950) исследовал текстурные признаки, которые используются человеком в особенности при оценке глубины. Бродац (1966) собрал интересный альбом с фотографиями текстур, представляющий своего рода вызов всем, кто собирается создавать алгоритмы для опознавания текстур.

Прослеживание контуров применялось как на непрерывных, так и на дискретных изображениях главным образом потому, что эту процедуру легко реализовать с помощью устройства сканирования с «бегущим лучом». Гриниас и др. (1963) использовали такое устройство для того, чтобы получить информацию о контуре непосредственно с изображений написанных от руки цифр. Мейсон и Клеменс (1968) использовали некоторым образом измененный вариант алгоритма прослеживания контуров, описанного выше, на дискретных изображениях знаков, напечатанных машинкой. Розенфельд (1970) обсуждал более сложный алгоритм прослеживания контуров и доказал, что этот алгоритм работает правильно, приведя предварительно доказательства некоторых теорем о связности в

дискретных изображениях. Ледли (1964) использовал операцию прослеживания контуров в анализе дискретных изображений хромосом. Остроумная комбинация алгоритмов прослеживания контуров и сглаживания была разработана Цанем (1969), в то время как Пингл (1969) построил оператор, объединяющий алгоритм прослеживания контуров с алгоритмом обнаружения края. Келли (1971) сообщил о новом «планирующем алгоритме прослеживания», который сначала получает грубую аппроксимацию контура на копии того же изображения с пониженной разрешающей способностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Барни, Сильверман (Barnea D. I., Silverman H. F.)
A class of algorithms for fast digital image registration, *IEEE Trans. Comp.*, **C-21**, 179—186 (February 1972).
Брайс, Феннема (Brice C. R., Fennema C. L.)
Scene analysis using regions, *Artificial Intelligence*, **1**, 205—226 (Fall, 1970).
Бродац (Brodatz P.)
Textures (Dover Publications, New York, 1966).
Ватанабе (Watanabe S., ed.)
Methodologies of pattern recognition (Academic Press, New York, 1969).
Гибсон (Gibson J. J.)
The perception of the visual world (Houghton Mifflin, Boston, Mass., 1950).
Голэй (Golay M. J. E.)
Hexagonal parallel pattern transformations, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **C-18**, 733—740 (August 1969).
Граселли (Grasselli A., ed.)
Automatic interpretation and classification of images (Academic Press, New York, 1969).
Грегори (Gregory R. L.)
Eye and brain, World University Library, McGraw-Hill, New York, 1966. [Русский перевод: Грегори Р., Глаз и мозг, «Прогресс», М., 1970.]
Гриниас, Мигер, Норман, Изиигер (Greanias E. C., Meagher P. F., Norman R. J., Essinger P.)
The recognition of handwritten numerals by contour analysis, *IBM Journal*, **7**, 14—21 (January 1963). [Русский перевод в журнале «Зарубежная радиоэлектроника», № 2, 1964.]
Гриффит (Griffith A. K.)
Mathematical models for automatic line detection, Proc. Second Int. Joint Conf. on Art. Int., 17—26 (London, 1971).
Грэхем и др. (Graham C. H. et al., eds.)
Vision and visual perception (John Wiley, New York, 1965).
Гузман (Guzmàn A.)
Decomposition of a visual scene into three-dimensional bodies, *Proc. FJCC*, **33**, 291—304 (1968). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», «Мир», М., 1973, стр. 241—268.]
Диннин (Dinneen G. P.)
Programming pattern recognition, Proc. WJCC, 94—100 (March 1955).
Дойль (Doyle W.)
Recognition of sloppy, hand-printed characters, Proc. WJCC, 133—142 (May 1960).
Ингрэм, Престон (Ingram M., Preston K.)
Automatic analysis of blood cells, *Scientific American*, **223**, 72—83 (November 1970).

Келли (Kelly M. D.)
Edge detection in pictures by computer using planning, Machine Intelligence 6, pp. 397—409, Meltzer B., Michie D., eds. (American Elsevier Publishing Co., New York, 1971).
Кенал (Kanal L. N., ed.)
Pattern recognition (Thompson Book Company, Washington, D. C., 1968).
Кенал, Рендал (Kanal L. N., Randall N. C.)
Recognition system design by statistical analysis, Proc. ACM National Conference (1964).
Колерс, Иден (Kolers P. A., Eden M., eds.)
Recognizing Patterns (MIT Press, Cambridge, Mass., 1968).
Корисвит (Cornsweet T. N.)
Visual Perception (Academic Press, New York, 1970).
Ледли (Ledley R. S.)
High-speed automatic analysis of biomedical pictures, *Science*, **146**, 216—223 (October 9, 1964).
Липкин, Розенфельд (Lipkin B. S., Rosenfeld A., eds.)
Picture processing and psychopictorics (Academic Press, New York, 1970).
Мансон (Munson J. H.)
Experiments in the recognition of hand-printed text: part I — Character recognition, *Proc. FJCC*, 1125—1138 (December 1968).
Мейсон, Клеменс (Mason S. J., Clemens J. K.)
Character recognition in an experimental reading machine for the blind, in Recognizing Patterns, pp. 156—167, Kolers P. A., Eden M., eds. (MIT Press, Cambridge, Mass., 1968). [Русский перевод в сб. «Распознавание образов. Исследование живых и автоматических распознающих систем», «Мир», М., 1970.]
Пингл (Pingle K. K.)
Visual perception by a computer, in Automatic Interpretation and Classification of Images, pp. 277—284, Grasselli A., ed. (Academic Press, New York, 1969).
Робертс (Roberts L. G.)
Machine perception of three-dimensional solids, in Optical and Electro-Optical Information Processing, pp. 159—197, Tippett J. T. et al., eds. (MIT Press, Cambridge, Mass., 1965). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», «Мир», М., 1973, стр. 162—208.]
Розенфельд (Rosenfeld A.)
Picture processing by computer (Academic Press, New York, 1969). [Русский перевод: Розенфельд А., Распознавание и обработка изображений, «Мир», М., 1972.]
Розенфельд (Rosenfeld A.)
Connectivity in digital pictures, *J. ACM*, **17**, 146—160 (January 1970).
Розенфельд, Тэрстон (Rosenfeld A., Thurston M.)
Edge and curve detection for visual scene analysis, *IEEE Trans. Comp.*, **C-20**, 562—569 (May 1971).
Симон, Гюйо (Simon J. C., Guiho G.)
Picture representation and transformations by computer, *Pattern Recognition*, 3, 169—178 (July 1971).
Типпет, Беркович, Клапп, Костер, Вандербург (Tippett J. T., Berkowitz D. A., Clapp L. C., Koester C. J., Vanderburgh A., eds.)
Optical and electro-optical information processing (MIT Press, Cambridge, Mass., 1965).
Ур (Uhr L., ed.)
Pattern Recognition (John Wiley, New York, 1966).
Фишер, Поллок, Рэдак, Стивенс (Fischer G. L., Jr., Pollock D. K., Radack B., Stevens M. E., eds.)
Optical Character Recognition (Spartan, Washington, D. C., 1962).
Форсен (Forsen G. E.)
Processing visual data with an automaton eye, in Pictorial Pattern Recognition,

pp. 471—502, Cheng G. C. et al., eds. (Thompson, Washington, D. C., 1968). [Русский перевод в сб. «Кибернетические проблемы бионики», вып. 2, «Мир», М., 1972, стр. 317—343.]

Хайлиман (Highleyman W. H.)
An analog method for character recognition, *IRE Trans. Elec. Comp.*, **EC-10**, 502—512 (September 1961).

Хуанг, Шрайбер, Третьяк (Huang T. S., Schreiber W. F., Tretiak O. J.)
Image processing, *Proc. IEEE*, **59**, 1586—1609 (November 1971). [Русский перевод в журнале «Труды ИИЭР», **59**, № 11, 1971.]

Хьюбель (Hubel D. H.)
The visual cortex of the brain, *Scientific American*, **209**, 54—62 (November 1963).

Хэрэлик, Келли (Haralick R. M., Kelly G. L.)
Pattern recognition with measurement space and spatial clustering for multiple images, *Proc. IEEE*, **57**, 654—665 (April 1969). [Русский перевод в журнале «Труды ИИЭР», **57**, № 4, 1969.]

Цань (Zahn C. T.)
A formal description for two-dimensional patterns, Proc. Int. Joint Conf. on Art. Int., pp. 621—628, Walker D. E., Norton L. M., eds. (May 1969).

Ченг, Ледли (Cheng G. C., Ledley R. S.)
A theory of picture digitization and applications, in Pictorial Pattern Recognition, pp. 329—352, G. C. Chang et al., eds. (Thompson, Washington, D. C., 1968).

Ченг, Ледли, Поллок, Розенфельд (Cheng G. C., Ledley R. S., Pollock D. K., Rosenfeld A., eds.)
Pictorial pattern recognition (Proc. Symp. Automatic Photointerpretation) (Thompson, Washington, D. C., 1968).

Ярбус А. Л.
Роль движений глаз в процессе зрения, «Наука», М., 1965.

Задачи

1. В процессе изучения земных ресурсов с самолета была снята фотография, причем известен угол наклона оси камеры относительно поверхности Земли, которая считается плоской. Разработайте такую схему (математические выкладки не обязательны) пространственной дискретизации плоскости изображения, при которой каждому элементу изображения соответствует равная площадь земной поверхности.

2. Лапласиан функции представляет собой сумму ее вторых (несмешанных) частных производных. Постройте алгоритм для вычисления приближенного значения лапласиана дискретной функции интенсивности и приведите несколько примеров, демонстрирующих качественно его действие.

3. Постройте сглаживающий оператор, который заполняет разрывы линий объекта, если ширина этих разрывов не превышает одного элемента.

4. Спроектируйте семейство локальных эталонов, которые можно будет использовать для классификации аккуратно написанных от руки печатных букв.

5. Разработайте оператор для обнаружения текстур, составленных из приблизительно параллельных прямых линий, таких, например, как на изображениях вельветовой ткани. Разработайте другой оператор для обнаружения текстур типа «елочки», как на твидовой ткани.

6. Сформулируйте критерий для процедуры объединения областей, который способствовал бы созданию и сохранению областей с прямолинейными границами.

7. Постройте алгоритм прослеживания контуров, пригодный для выделения контуров 8-связных дискретных объектов.

Глава 8

АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ЧАСТОТ

8.1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе мы хотим определить операцию двумерного преобразования Фурье и обсудить некоторые ее применения в анализе сцен. Наш интерес к этому преобразованию вызван двумя причинами: оно дает одновременно и хороший аппарат для исследования некоторых теоретических аспектов обработки изображений, и удобные средства для реализации таких операций, как сглаживание, повышение резкости и сравнение с эталоном.

Прежде чем переходить к деталям, мы должны сделать два замечания. Во-первых, мы предполагаем, что читатель хотя бы слегка знаком с одномерным преобразованием Фурье, которое широко используется в теории связи. Во-вторых, читателя, склонного к цифровым методам, мы спешим уверить, что, хотя наше обсуждение будет проводиться полностью на языке аналоговых функций интенсивности, имеются весьма эффективные цифровые методы вычисления результатов преобразования Фурье для дискретного изображения. Вообще говоря, для выполнения этого преобразования имеются как хорошие аналоговые, так и хорошие цифровые методы. Одновременное развитие оптических средств для изображений в аналоговой форме и так называемого быстрого преобразования Фурье для изображений в цифровой форме удваивает наш интерес к обсуждению возможных применений частотных методов в анализе сцен.

Наше обсуждение мы начнем с нескольких фундаментальных определений. Пусть имеется аналоговая функция интенсивности $g(x, y)$, заданная на бесконечной плоскости. Определим *преобразование Фурье* $\mathcal{F}$, создающее *спектр Фурье* $G(f_x, f_y)$, следующим образом:

$$G(f_x, f_y) = \mathcal{F}\{g(x, y)\} = \int_{-\infty}^{\infty}\int g(x, y) \exp[-2\pi i (f_x x + f_y y)]\,dx\,dy. \quad (1)$$

Определим также *обратное преобразование Фурье* $\mathcal{F}^{-1}$, переводящее спектр $G(f_x, f_y)$ в исходную функцию $g(x, y)$:

$$g(x, y) = \mathcal{F}^{-1}\{G(f_x, f_y)\} = \int_{-\infty}^{\infty}\int G(f_x, f_y) \exp[2\pi i (f_x x + f_y y)]\,df_x df_y. \quad (2)$$

Оставим пока в стороне вопросы математического характера о существовании определенных интегралов и посмотрим, в чем заключается смысл этих определений. Можно считать, что формула (2) описывает разложение функции интенсивности $g(x, y)$ в ряд, который представляет собой «обобщенную сумму» экспоненциальных функций комплексного аргумента. Для каждой пары значений *пространственных частот* f_x и f_y в обобщенной сумме имеется одна экспонента, которая умножается на весовой коэффициент $G(f_x, f_y)$. Как же получаются эти весовые коэффициенты? Согласно фундаментальному результату анализа Фурье, называемому обратной теоремой, весовые коэффициенты определяются по формуле (1). Таким образом, спектр Фурье функции $g(x, y)$ можно считать просто набором весовых коэффициентов ее разложения в ряд, представляющий собой (обобщенную) сумму экспоненциальных функций.

Вернемся на короткое время к вопросу о существовании пары преобразований Фурье (1) и (2). Ответ на этот вопрос может показаться не слишком элегантным по форме. Он заключается в следующей совокупности обычно принимаемых достаточных условий:

1) функция g должна быть абсолютно интегрируемой на всей плоскости изображения;

2) функция g должна иметь конечное число разрывов и конечное число максимумов и минимумов в любой прямоугольной области конечных размеров;

3) функция g не должна иметь бесконечных разрывов.

Хотя вопрос о существовании преобразования Фурье интересен с математической точки зрения, мы в дальнейшем им заниматься не будем, поскольку проблемы, связанные с существованием определенных интегралов, на практике, как правило, никаких трудностей не вызывают.

Нам хотелось бы рассмотреть несколько более детально, какие следствия вытекают из определения пары преобразований Фурье и в чем заключается их смысл. В частности, будет показано, что высокие пространственные частоты соответствуют резким изменениям интенсивности на изображении. Мы видели, что спектр функции интенсивности определяет весовые коэффициенты ее разложения в ряд, составленный из комплексных экспонент; поэтому для понимания смысла преобразования нужно хорошо представлять себе, как выглядит экспоненциальная функция

$$\exp\left[2\pi i\left(f_x x + f_y y\right)\right]$$

для заданных значений f_x и f_y. К сожалению, эта функция двух переменных x и y принимает комплексные значения, и ее трудно изобразить графически. Некоторое представление о ее виде можно получить, если пометить на плоскости (X, Y) области, в которых эта функция вещественна и положительна. Эти так называемые области нулевой фазы можно найти, приравняв показатель экспоненты

величине $2\pi in$ для всех целых n. Это приводит к уравнению

$$2\pi i(f_x x+f_y y)=2\pi in,$$

или

$$y=-\frac{f_x}{f_y}x+\frac{n}{f_y}.$$

Таким образом, как показано на рис. 8.1 [1]), области нулевой фазы представляют собой прямые параллельные линии. Наклон каждой

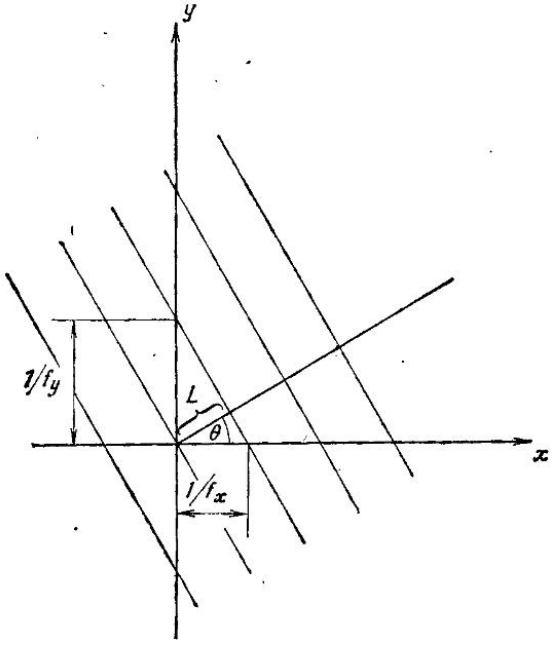


Рис. 8.1. Геометрическое место точек нулевой фазы. (Из книги Дж. Гудмэна «Введение в фурье-оптику». Авторские права 1968 г. издательства McGraw-Hill, Inc. Воспроизводится с разрешения McGraw-Hill Book Company.)

прямой равен $-(f_x/f_y)$, а их общая нормаль ориентирована под углом $\theta=\operatorname{arctg}(f_x/f_y)$. Расстояние L между этими прямыми называется *пространственным периодом* и определяется формулой

$$L=\frac{1}{\sqrt{f_x^2+f_y^2}}.$$

Следовательно, чем выше пространственные частоты, тем теснее расположены линии нулевой фазы. С каждой точкой (f_x, f_y) на плоскости пространственных частот связаны два геометрических параметра: угол ориентации θ и интервал L.

[1]) Из книги Гудмэна (1968).

Попробуем теперь понять, что означает появление пространственной частоты с большой амплитудой в спектре Фурье некоторого изображения. Пусть, например, у нас есть изображение $g(x, y)$, спектр которого $G(f_x, f_y)$ достигает большой величины, скажем, в точке (u, v). Поскольку значение $G(u, v)$ велико, слагаемое $G(u, v)\exp[2\pi i(ux+vy)]$ вносит значительный вклад в обобщенную сумму экспонент в формуле (2). Легко показать, что, поскольку функция $g(x, y)$ вещественная, справедливо равенство $G(f_x, f_y)=G^*(-f_x, -f_y)$, где звездочка обозначает комплексно сопряженную величину. Так как модули комплексно сопряженных величин равны, то величина $G(-u, -v)$ равна по модулю $G(u, v)$, и поэтому слагаемое

$$G(-u, -v)\exp[2\pi i(-ux, -vy)]$$

также вносит значительный вклад в сумму экспонент формулы (2). Предположим теперь, что функция $G(f_x, f_y)$ мала по модулю всюду, кроме точек (u, v) и $(-u, -v)$. Тогда изображение достаточно хорошо аппроксимируется формулой

$$G(u, v)\exp[2\pi i(ux+vy)]+G(-u, -v)\exp[2\pi i(-ux-vy)],$$

поскольку это слагаемое преобладает в сумме экспонент выражения (2). Легко показать, что это слагаемое представляет собой вещественную величину; если изобразить ее графически, она будет выглядеть, как волнистая поверхность синусоидальной формы, гребни которой образуют параллельные линии, подобные изображенным на рис. 8.1. Следовательно, каждая симметричная пара пространственных частот (u, v) и $(-u, -v)$ вызывает появление в обобщенной сумме (2) слагаемого, представляющего изображение параллельных полос с изменением интенсивности по синусоидальному закону. Чем больше модуль спектра в точке (u, v), тем значительней вклад, вносимый этим слагаемым.

Пусть, например, у нас есть функция интенсивности $g(x, y)$, состоящая из вертикальных темных и светлых полос. Если интенсивность при переходе от темных полос к светлым меняется по синусоидальному закону, спектр Фурье $G(f_x, f_y)$ не равен нулю только в двух точках плоскости пространственных частот, причем обе точки лежат на оси f_x. Если перепады интенсивности более резкие, спектр Фурье будет отличен от нуля более чем в двух точках; однако вне оси f_x он по-прежнему равен нулю, так как полосы на изображении вертикальны. Как и в случае одномерного преобразования Фурье, чем резче перепады интенсивности, тем больше будет величина $G(f_x, 0)$ для больших значений f_x.

В общем случае края на изображении создают пространственные частоты вдоль линии на плоскости комплексных частот, перпендикулярной краю. Чем резче край, тем дальше от начала координат мы должны уйти по этой линии, чтобы величина весовых коэффициен-

тов стала незначительной. Таким образом, наш качественный вывод заключается в том, что высокие пространственные частоты соответствуют резким краям, низкие — отсутствию краев (т. е. областям с приблизительно постоянным уровнем полутонов), а ориентация пространственной частоты соответствует ориентации края на изображении.

8.2. ТЕОРЕМА ОТСЧЕТОВ

В предыдущей главе мы оставили без ответа вопрос о том, насколько точно следует квантовать изображение, чтобы сохранить всю содержащуюся в нем информацию. Рассмотрим теперь основной теоретический результат, относящийся к этому вопросу, а именно знаменитую теорему отсчетов Шеннона [1]).

Основная идея теоремы отсчетов заключается в установлении соответствия между резкими изменениями интенсивности на изображении и высокими пространственными частотами в его спектре. Если спектр изображения не содержит высоких частот, то само изображение не содержит резких перепадов уровня полутонов, и поэтому можно предположить, что такое изображение не следует квантовать слишком точно. В соответствии с этим мы будем называть функцию интенсивности $g(x, y)$ *ограниченной по полосе частот*, если ее спектр Фурье $G(f_x, f_y)$ равен нулю во всех точках, где $|f_x|$ или $|f_y|$ больше, чем некоторая величина W. Теорема отсчетов Шеннона утверждает, что ограниченная по полосе частот функция может быть *точно* восстановлена по отсчетам изображения, взятым на ненулевом расстоянии друг от друга, а также показывает, как должно выполняться восстановление.

Математические детали теоремы отсчетов станут несколько ясней, если мы ограничим наше внимание одномерным случаем. В случае одномерной функции интенсивности [2]) формулы прямого и обратного преобразований Фурье (1) и (2) принимают более простой вид:

$$G(f_x) = \mathcal{F}\{g(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \exp[-2\pi i f_x x]\, dx \qquad (3)$$

---

[1]) В отечественной литературе эта теорема называется теоремой Котельникова. Она была сформулирована В. А. Котельниковым в 1933 г. задолго до появления работ Шеннона. Обобщение теоремы отсчетов для функций двух переменных было дано Н. К. Игнатьевым в 1958 г. — *Прим. перев.*

[2]) Как и раньше, мы можем предположить, что одномерная функция интенсивности представляет собой значения двумерной функции вдоль разреза в плоскости изображения.

и

$$g(x) = \mathcal{F}^{-1}\{G(f_x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} G(f_x) \exp[2\pi i f_x x]\, df_x. \quad (4)$$

Одномерная функция интенсивности $g(x)$ ограничена по полосе частот, если ее спектр Фурье $G(f_x)$ равен нулю во всех точках, где $|f_x|$ больше, чем некоторая величина W, называемая *шириной полосы частот*.

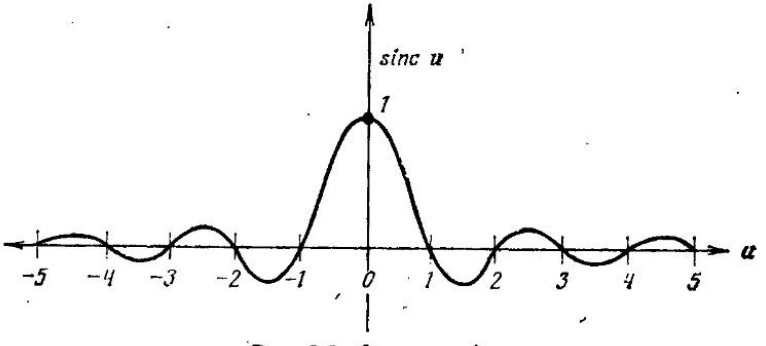


Рис. 8.2. Функция sinc.

Для того чтобы упростить формулировку теоремы отсчетов, нам необходимо сначала ввести одно дополнительное определение. Поскольку при доказательстве теоремы появляются функции вида $\sin(\pi u)/\pi u$, определим новую функцию, обозначив ее sinc:

$$\operatorname{sinc} u = \frac{\sin(\pi u)}{\pi u}.$$

График этой функции показан на рис. 8.2.

Предположим теперь, что нам дана (одномерная) функция интенсивности g и ее спектр Фурье G ограничен по ширине полосы частот величиной W. Разложим функцию $G(f_x)$ в ряд Фурье на интервале $-W < f_x < W$:

$$G(f_x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \exp\left[-2\pi i f_x \left(\frac{m}{2W}\right)\right], \quad (5)$$

где коэффициенты разложения c_m определяются формулой

$$c_m = \frac{1}{2W} \int_{-W}^{W} G(f_x) \exp\left[2\pi i f_x \left(\frac{m}{2W}\right)\right] df_x. \quad (6)$$

Спектр G тождественно равен нулю вне его полосы частот, поэтому в формуле обратного преобразования (4) мы можем заменить бес-

конечные пределы на $\pm W$. Следовательно, интеграл в формуле (6) представляет собой точный результат $g(x)$ обратного преобразования, вычисленный в точках $x=m/2W$. Поэтому выражение (6) принимает вид

$$c_m = \frac{1}{2W} g\left(\frac{m}{2W}\right). \tag{7}$$

Подставляя (7) в (5), получаем

$$G(f_x) = \frac{1}{2W} \sum_{m=-\infty}^{\infty} g\left(\frac{m}{2W}\right) \exp\left[-2\pi i f_x \left(\frac{m}{2W}\right)\right] \text{ при } -W < f_x < W,$$

$$G(f_x) = 0 \text{ в остальных случаях.} \tag{8}$$

Уже из формулы (8) можно видеть, что функция интенсивности g полностью определяется отсчетами, взятыми на конечном расстоянии друг от друга, поскольку ее спектр зависит только от величин g, взятых с интервалом $1/2W$. Окончательный вывод теоремы отсчетов может быть получен применением обратного преобразования Фурье к выражению (8). Это нетрудно, поскольку для этого необходимо лишь проинтегрировать экспоненциальную функцию в пределах от $-W$ до W. Пропуская подробности, выпишем результат:

$$g(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} g\left(\frac{m}{2W}\right) \operatorname{sinc}\left[2W\left(x - \frac{m}{2W}\right)\right]. \tag{9}$$

Выражение (9) и есть результат теоремы отсчетов Шеннона. На словах оно означает, что функцию g можно воспроизвести, расположив набор функций sinc через интервалы $1/2W$ вдоль оси X, введя масштабирование умножением каждой функции sinc на величину отсчета g, взятого в ее центральной точке, и сложив все масштабированные функции sinc. Чем больше ширина полосы частот W, тем меньше должен быть отсчетный интервал $1/2W$. Смысл этого утверждения очевиден: бóльшая полоса частот означает, что функция интенсивности может изменяться быстрей, и поэтому отсчеты должны располагаться чаще с тем, чтобы уловить все эти изменения. Другой теоретический результат, подтверждающий такую интерпретацию, известен как неравенство Бернштейна. Это неравенство, которое мы приводим без доказательства, можно сформулировать следующим образом. Предположим, что функция интенсивности не только ограничена по полосе частот, но и не превышает по модулю некоторой величины M. Тогда ее производная не превышает по модулю $2\pi WM$. Выразим ту же мысль с помощью формул: если для функции g ширина полосы частот равна W и $|g(x)| < M$ для всех x, то $|g'(x)| \leqslant 2\pi WM$. Поскольку любое физически существующее изображение имеет ограниченную интенсивность, из неравенства

Бернштейна следует, что максимальная скорость изменения функции интенсивности пропорциональна ширине ее полосы частот.

Для двумерных функций интенсивности положение полностью аналогично только что исследованному одномерному случаю как в математическом плане, так и с точки зрения качественного анализа. Двумерную функцию интенсивности можно полностью определить ее отсчетами, взятыми в узлах квадратной сетки с интервалом $1/2W$. Незначительное усложнение связано с тем обстоятельством, что эта функция может иметь различную ширину полосы частот в направлении осей f_x и f_y, т. е. спектр $G(f_x, f_y)=0$, когда либо $|f_x|>W_x$, либо $|f_y|>W_y$. Если такой случай имеет место, мы можем брать отсчеты в узлах прямоугольной, а не квадратной сетки с интервалами $1/2W_x$ и $1/2W_y$ в направлении осей X и Y соответственно. При этом небольшом обобщении двумерный аналог формулы (9) выглядит следующим образом:

$$g(x, y)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty} g\left(\frac{m}{2W_x}, \frac{n}{2W_y}\right)\times$$
$$\times \operatorname{sinc}\left[2W_x\left(x-\frac{m}{2W_x}\right)\right]\operatorname{sinc}\left[2W_y\left(y-\frac{n}{2W_y}\right)\right]. \qquad (10)$$

Здесь снова имеется сумма (произведений) функций sinc, причем каждое слагаемое помножено на масштабный коэффициент, равный величине соответствующего отсчета исходной функции интенсивности.

Итак, теорема отсчетов представляет для нас интерес с двух дополняющих друг друга точек зрения. С точки зрения практики она показывает, насколько точно нужно квантовать функцию интенсивности, чтобы сохранить всю первоначальную информацию. С точки зрения качественного анализа она дает дополнительное понимание смысла высоких пространственных частот.

8.3. СРАВНЕНИЕ С ЭТАЛОНОМ И ТЕОРЕМА О СВЕРТКЕ

Мы уже писали в предыдущей главе о том, что сравнение с эталоном во всем многообразии своих форм представляет собой одну из фундаментальных операций анализа изображений. Теперь мы хотели бы установить связь между одной из форм сравнения с эталоном и преобразованием Фурье. Для наших целей удобней считать, что сравнение с эталоном выполняется с помощью вычисления функции взаимной корреляции. Ее определение в дискретной форме было дано в выражении (5) гл. 7, но существует такое же определение и для аналоговых функций. Пусть даны аналоговая функция интенсивности $g(x, y)$ и аналоговый эталон $t(x, y)$. Тогда их

функция взаимной корреляции $R_{gt}(x, y)$ определяется формулой [1])

$$R_{gt}(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\, t(\alpha - x, \beta - y)\, d\alpha\, d\beta. \tag{11}$$

В силу определенных причин, которые пока не очевидны, будем называть *сверткой* $g*t$ двух функций интенсивности g и t следующую величину:

$$g*t(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\, t(x - \alpha, y - \beta)\, d\alpha\, d\beta. \tag{12}$$

Операция свертки коммутативна и может интерпретироваться следующим образом: функция t переносится в заданную точку (x, y) и затем переворачивается относительно перенесенных осей координат. Далее вычисляется взаимная корреляция между перевернутой функцией t и исходной функцией интенсивности g. В соответствии с этим, если эталон описывается функцией $t(x, y)$, его перевернутый вариант $\hat{t}(x, y)$ определяется формулой

$$\hat{t}(x, y) = t(-x, -y).$$

Ясно, что

$$g*\hat{t}(x, y) = R_{gt}(x, y), \tag{13}$$

поскольку

$$\begin{aligned} g*\hat{t}(x, y) &= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\, \hat{t}(x - \alpha, y - \beta)\, d\alpha\, d\beta = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\, t(\alpha - x, \beta - y)\, d\alpha\, d\beta = \\ &= R_{gt}(x, y). \end{aligned}$$

Таким образом, свертка, по существу, эквивалентна корреляции. Мы увидим в скором времени из теоремы о свертке, что свертка эквивалентна также перемножению спектров. Следовательно, у нас появится возможность вычисления взаимной корреляции путем перемножения.

Чтобы упростить доказательство теоремы о свертке, рассмотрим предварительно более простое утверждение, называемое обычно теоремой о сдвиге.

Теорема о сдвиге. *Если* $\mathcal{F}\{g(x, y)\} = G(f_x, f_y)$, *то*

$$\mathcal{F}\{g(x - \alpha, y - \beta)\} = \exp[-2\pi i (f_x\alpha + f_y\beta)]\, G(f_x, f_y).$$

[1]) В формуле (7.5) пределы суммирования выбирались такими, чтобы аргументы функции t попадали в область перемещенного эталона. Здесь для наших целей удобней использовать бесконечные пределы и считать, что эталонная функция равна нулю за пределами основной области.

Доказательство. Записав определение спектра и подставив величины $x'=x-\alpha$ и $y'=y-\beta$, получим

$$\mathcal{F}\{g(x-\alpha,\ y-\beta)\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(x-\alpha,\ y-\beta)\exp[-2\pi i(f_x x+f_y y)]\,dx\,dy =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(x', y')\exp[-2\pi i(f_x(x'+\alpha)+f_y(y'+\beta))]\,dx'\,dy' =$$

$$= \exp[-2\pi i(f_x\alpha+f_y\beta)]\,G(f_x, f_y),$$

что доказывает теорему.

После этих предварительных замечаний сформулируем теорему о свертке и коротко докажем ее.

Теорема о свертке. *Если даны две функции g и t со спектрами Фурье G и T, то*

$$\mathcal{F}\{g*t(x, y)\} = \mathcal{F}\{g(x, y)\}\,\mathcal{F}\{t(x, y)\} = G(f_x, f_y)\,T(f_x, f_y).$$

Доказательство. По определению

$$\mathcal{F}\{g*t(x, y)\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int \left\{\int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\,t(x-\alpha,\ y-\beta)\,d\alpha\,d\beta\right\}\exp[-2\pi i(f_x x+f_y y)]\,dx\,dy.$$

Изменив порядок интегрирования, получим

$$\mathcal{F}\{g*t(x, y)\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\int t(x-\alpha,\ y-\beta)\exp[-2\pi i(f_x x+ f_y y)]\,dx\,dy\right\}d\alpha\,d\beta =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\,[\mathcal{F}\{t(x-\alpha,\ y-\beta)\}]\,d\alpha\,d\beta.$$

Согласно теореме о сдвиге,

$$\mathcal{F}\{g*t(x, y)\} = \int_{-\infty}^{\infty}\int g(\alpha, \beta)\,T(f_x, f_y)\exp[-2\pi i(f_x\alpha+f_y\beta)]\,d\alpha\,d\beta =$$

$$= G(f_x, f_y)\,T(f_x, f_y),$$

что и завершает доказательство.

Из теоремы о свертке и формулы (13) можно получить следующую формулу для вычисления функции взаимной корреляции

изображения g и эталона t:

$$R_{gt}(x, y) = g * \hat{t}(x, y) = \\ = \mathcal{F}^{-1}\{G(f_x, f_y)\,\hat{T}(f_x, f_y)\}. \qquad (14)$$

Выражение (14) представляет собой широко применяемый оператор, посредством которого метод преобразования Фурье используется для сравнения с эталоном. Хотя в этой формуле преобразование выполняется трижды, иногда это сделать проще, чем вычислять корреляцию непосредственно. Особенно это справедливо по отношению к изображениям в аналоговой форме, существующим в виде диапозитивов, поскольку преобразование Фурье и перемножение легко реализуются оптическими средствами. Заметим, что формула (14) дает величину взаимной корреляции в любой точке. Другими словами, величины взаимной корреляции для всех положений эталона получаются с помощью единственной операции. Мы можем поэтому считать $R_{gt}(x, y)$ особой «функцией интенсивности», величина которой отображает степень соответствия между изображением и эталоном, смещенным в точку (x, y). По этой причине данную операцию часто предлагают в качестве средства для обнаружения «объекта» t где-либо на изображении g.

8.4. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ

В предыдущем разделе мы показали, что взаимная корреляция может вычисляться на плоскости частот простым перемножением спектров. В данном разделе нам хотелось бы рассмотреть несколько более детально, в чем заключается смысл перемножения спектров, и указать некоторые другие приложения.

Введем сначала несколько терминов. Пусть у нас есть первоначальная входная функция интенсивности $g_i(x, y)$ со спектром Фурье $G_i(f_x, f_y)$ и мы умножаем G_i на другую функцию $H(f_x, f_y)$. Функция H определяет *линейный пространственный фильтр* и называется *передаточной функцией* этого фильтра. Произведение

$$G_0(f_x, f_y) = G_i(f_x, f_y)\,H(f_x, f_y)$$

представляет собой спектр Фурье выходного сигнала фильтра. Выходная функция интенсивности $g_0(x, y)$ представляет собой результат обратного преобразования Фурье от функции G_0. Согласно теореме о свертке,

$$g_0(x, y) = \mathcal{F}^{-1}\{G_0(f_x, f_y)\} = \\ = \mathcal{F}^{-1}\{G_i(f_x, f_y)\,H(f_x, f_y)\} = g_i * h(x, y), \qquad (15)$$

где

$$h(x, y) = \mathcal{F}^{-1}\{H(f_x, f_y)\}.$$

Функция $h(x, y)$ называется *импульсной реакцией* или *функцией рассеивания точки*. Ясно, что в соответствии с теоремой о свертке фильтр может быть задан либо его передаточной функцией H, либо его импульсной реакцией h. Рассмотрим, в чем смысл функции $h(x, y)$. Пусть нашей входной функцией $g_i(x, y)$ является дельта-функция Дирака $\delta(x, y)$. Применяя формулу (15), получим

$$g_0(x, y) = \delta(x, y) * h(x, y) =$$
$$= \int\int h(\alpha, \beta)\,\delta(x-\alpha, y-\beta)\,d\alpha\,d\beta = h(x, y).$$

Таким образом, функция $h(x, y)$ представляет собой реакцию фильтра на яркую световую точку.

Теорема о свертке позволяет нам интерпретировать процесс пространственной фильтрации двумя различными способами: выходной сигнал фильтра можно считать либо сверткой входного изображения и импульсной реакции фильтра, либо результатом обратного преобразования Фурье от произведения передаточной функции фильтра и спектра входного изображения. Каждая из этих точек зрения может быть полезной в различных ситуациях. В предыдущем разделе, когда мы рассматривали сравнение с эталоном, было удобней использовать интерпретацию посредством свертки (т. е. на плоскости изображения); импульсная реакция соответствовала перевернутому эталону, а процесс фильтрации был эквивалентен вычислению функции взаимной корреляции. В данном разделе мы собираемся сделать упор на трактовку процесса пространственной фильтрации в плоскости частот.

Прежде чем двигаться дальше, мы должны сказать несколько слов о «линейности» линейных пространственных фильтров. Пусть мы имеем дело с произвольной фильтрующей операцией $\mathcal{F}$, которая превращает входное изображение g в выходное изображение $\mathcal{F}(g)$. Операцию называют линейной, если для любой константы α и любых двух функций интенсивности g_1 и g_2 справедливо равенство $\mathcal{F}(\alpha g_1 + g_2) = \alpha\mathcal{F}(g_1) + \mathcal{F}(g_2)$. Преобразование Фурье само по себе линейно; легко показать, что

$$\mathcal{F}\{\alpha g_1 + g_2\} = \alpha\mathcal{F}\{g_1\} + \mathcal{F}\{g_2\}.$$

Используя это свойство и вторую строку формулы (15), нетрудно убедиться, что фильтры, которые мы рассматриваем, в самом деле линейны. Далее мы по-прежнему ограничим наше внимание линейными фильтрами.

Смысл линейной пространственной фильтрации, видимо, лучше уяснить с помощью нескольких примеров. С этой целью рассмотрим и проиллюстрируем операции *низкочастотной* и *высокочастотной* пространственной фильтрации. Фильтр низких частот характеризуется передаточной функцией $H(f_x, f_y)$, имеющей относительно малую величину для точек (f_x, f_y), удаленных от начала координат

на плоскости частот, и имеющей относительно большую величину для частот вблизи начала координат. Другими словами, фильтр низких частот подавляет высокие пространственные частоты и пропускает низкие. Поскольку мы уже отмечали, что высокие пространственные частоты вызываются резкими краями на исходном изображении, следует ожидать, что фильтр низких частот будет сглаживать резкие края и, следовательно, давать «расплывчатые» изображения. Процесс фильтрации низких частот, по существу, аналогичен операции пространственного сглаживания, обсуждавшейся в предыдущей главе. Фильтр высоких пространственных частот, напротив, характеризуется передаточной функцией, имеющей относительно большую величину для пространственных частот, удаленных от начала координат, и относительно малую величину для частот, близких к началу координат. Другими словами, фильтр высоких частот подавляет низкие частоты и пропускает высокие. Поскольку высокие пространственные частоты соответствуют резким краям, фильтр высоких частот подчеркивает края, и, следовательно, его действие аналогично пространственному дифференцированию. В качестве примера рассмотрим последовательность изображений, показанную на рис. 8.3а—8.3е. На рис. 8.3а показана та же самая картинка с телевизионного монитора, которая была использована для иллюстраций в предыдущей главе. На рис. 8.3б снова показан дискретный вариант этого изображения размером 120×120 элементов с квантованием интенсивности на 16 уровней от черного (нуль) до белого (15). На рис. 8.3в показан спектр Фурье дискретного изображения. Чтобы детали были ясней, мы воспроизвели логарифм модуля спектра; по случайным причинам большие значения здесь представлены черным. Заметим, что спектр имеет большую величину вдоль осей f_x и f_y. Причиной этого служат соответственно вертикальные и горизонтальные края на исходном изображении. Подобно этому, наклонные края на исходном изображении дают темные диагональные полосы в спектре, причем каждая из полос перпендикулярна по крайней мере одному наклонному краю. И наконец, заметим, что исходное изображение содержит большие области с приблизительно постоянной интенсивностью; поэтому спектр имеет значительную величину вблизи начала координат.

Отвлечемся на короткое время от основной темы, чтобы сказать несколько слов о масштабе по осям f_x и f_y на рис. 8.3в. Единица частоты всегда обратна единице расстояния, используемой в плоскости изображения. Нам не приходилось измерять расстояние на плоскости изображения, и у нас нет какой-либо специальной единицы. Поскольку мы имеем дело с дискретными изображениями, примем в качестве такой единицы размер одного элемента изображения. Тогда единицей пространственной частоты будет (элемент изображения)$^{-1}$, или, попросту говоря, число периодов на элемент изображения. Исходное аналоговое изображение рис. 8.3а было

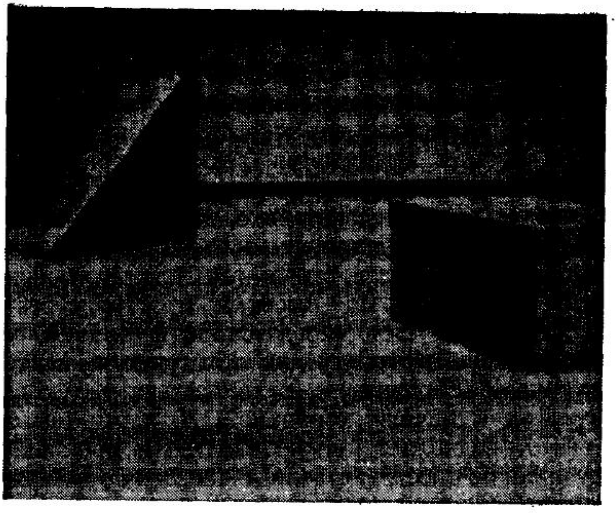
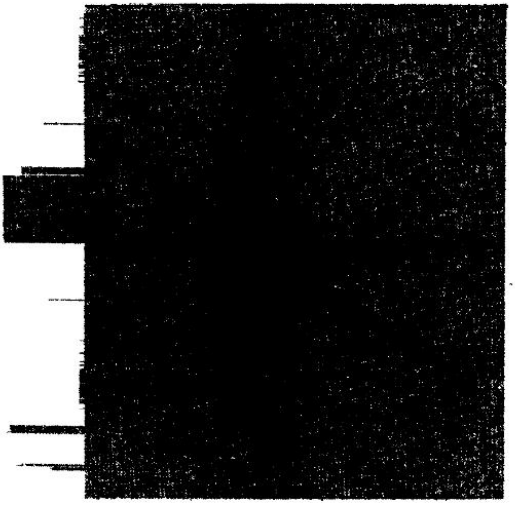


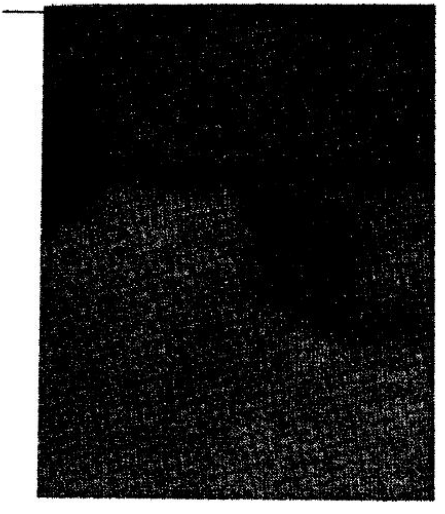
Рис. 8.3а. Изображение на телевизионном мониторе.



Рис. 8.3б. Дискретное изображение.



в. Логарифм модуля спектра Фурье.



г. Результат низкочастотной фильтрации.

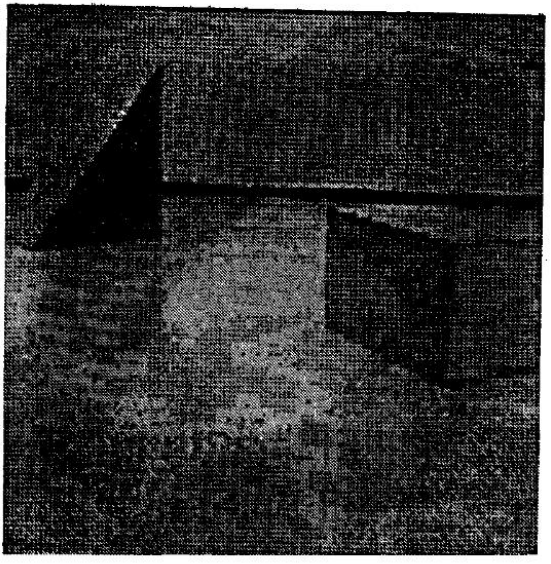


Рис. 8.3д. Результат высокочастотной фильтрации.

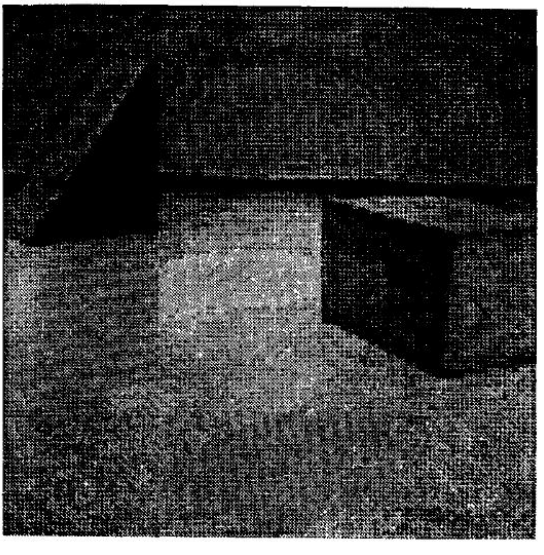


Рис. 8.3е. Результат операции подчеркивания высоких частот

квантовано по определению с интервалом в один элемент, и в результате получилось дискретное изображение (рис. 8.3б). Из теоремы отсчетов Шеннона мы знаем, что такой интервал квантования позволяет точно восстановить аналоговое изображение только в том случае, если оно ограничено по полосе частот и его пространственные частоты меньше величины в ½ периода на элемент изображения. То же самое можно установить качественным рассуждением: наивысшая воспроизводимая пространственная частота в дискретном изображении соответствует последовательности попеременно черных и белых элементов, и такой сигнал как раз и дает пространственную частоту точно в ½ периода на элемент изображения. Таким образом, как с математической точки зрения, так и качественно наивысшая пространственная частота для рис. 8.3в равна ½ периода на элемент, и, следовательно, частоты по осям f_x и f_y изменяются от $-½$ до $+½$ периода на элемент изображения.

Теперь пропустим полученный спектр Фурье через фильтр низких частот. В связи с предыдущим обсуждением передаточную функцию фильтра $H(f_x, f_y)$ следует определять только для пространственных частот, меньших чем ½. Для иллюстрации мы применили передаточную функцию

$$H(f_x, f_y) = [(\cos \pi f_x)(\cos \pi f_y)]^{16}. \qquad (16)$$

Заметим, что $H(0, 0)=1$, т. е. пространственная частота (0, 0) «проходит» без изменений. На высоких частотах, например когда f_x или f_y равны ½, передаточная функция $H(f_x, f_y)=0$. Таким образом, высокие частоты сильно подавляются. Мы возвели произведение косинусов в выбранную произвольно 16-ю степень, чтобы получить резкий спад передаточной функции от максимума, равного 1, к минимуму, равному 0. Чтобы применить этот фильтр низких частот, мы просто выполнили операции, диктуемые второй строкой формулы (15); спектр Фурье дискретного изображения (рис. 8.3в) умножался на передаточную функцию, определяемую уравнением (16), и произведение подвергалось обратному преобразованию Фурье. Результат показан на рис. 8.3г. Как и ожидалось, мы получили весьма расплывчатый вариант исходного изображения, настолько нерезкий, что вряд ли он может быть для чего-то полезен. Мы поступили так умышленно, чтобы сделать качественный эффект низкочастотной фильтрации более заметным; ясно, однако, что фильтрация низких частот, как и пространственное сглаживание, должна применяться осторожно. Можно получить меньшую расплывчатость, уменьшив показатель степени в формуле (16).

Рассмотрим теперь два примера фильтрации высоких частот. В первом примере мы применим передаточную функцию

$$H(f_x, f_y) = 1{,}5 - [(\cos \pi f_x)(\cos \pi f_y)]^4. \qquad (17)$$

Эта функция равна 0,5 в начале координат на плоскости частот, а в точках, где либо $|f_x|$, либо $|f_y|$ равны ½, принимает значение 1,5. Другими словами, этот фильтр подавляет низкие частоты (но не полностью) и «поднимает» высокие частоты. Произведение косинусов возводится в четвертую степень, и это означает, что перепад функции от низких частот к высоким не такой резкий, как в предыдущем примере. Результат применения этого фильтра к тому же изображению показан на рис. 8.3д. Здесь мы видим, что некоторые края, расплывчатые на рис. 8.3б, стали немного резче; в то же время шумовые выбросы в области пола стали несколько более заметны. Поскольку низкие частоты подавлены, темный треугольник клина стал теперь светлее и менее равномерным по интенсивности.

В качестве второго примера высокочастотной фильтрации мы применим фильтр с передаточной функцией

$$H(f_x, f_y) = 2{,}0 - [(\cos \pi f_x)(\cos \pi f_y)]^4. \qquad (18)$$

Эта функция отличается от предыдущей только добавлением константы 0,5; ее величина меняется от 1,0 в начале координат до 2,0 на высоких частотах. Поэтому операцию, выполняемую таким фильтром, естественно назвать «подчеркиванием высоких частот». Результат ее применения к тому же изображению показан на рис. 8.3е. Эта картинка больше похожа на исходную, чем рис. 8.3д, так как низкие частоты здесь не подавлялись, и общее соотношение между светлыми и темными областями осталось поэтому неизменным. Подчеркивание выразилось в том, что края стали несколько более заметными, но не чересчур сильно.

На рис. 8.4а—8.4е показана другая серия примеров, иллюстрирующих результаты применения описанной последовательности операций к другому исходному изображению. На рис. 8.4а показана картинка с телевизионного монитора, изображающая вид через открытую дверь комнаты. Черные прямоугольники слева представляют собой наклеенные на стену куски черной бумаги, и мы, таким образом, можем сравнивать «реальные» объекты, такие, как кресло, с «идеальными» черно-белыми объектами, имеющими прямолинейные границы. Рис. 8.4б представляет собой дискретное изображение размером 120×120 элементов, а рис. 8.4в показывает логарифм модуля его спектра Фурье. Все края, заметные на дискретном изображении, ориентированы горизонтально или вертикально, и поэтому все существенные высокочастотные компоненты в спектре Фурье расположены вдоль осей f_x и f_y. На рис. 8.4г показан результат обработки дискретного изображения фильтром низких частот с передаточной функцией (16). Рис. 8.4д показывает результат применения высокочастотного фильтра, определяемого формулой (17). На этом изображении некоторые детали, такие, как книжный шкаф, выглядят немного более разборчиво. Заметим, что длинный черный прямоугольник имеет очень темную границу, окруженную очень

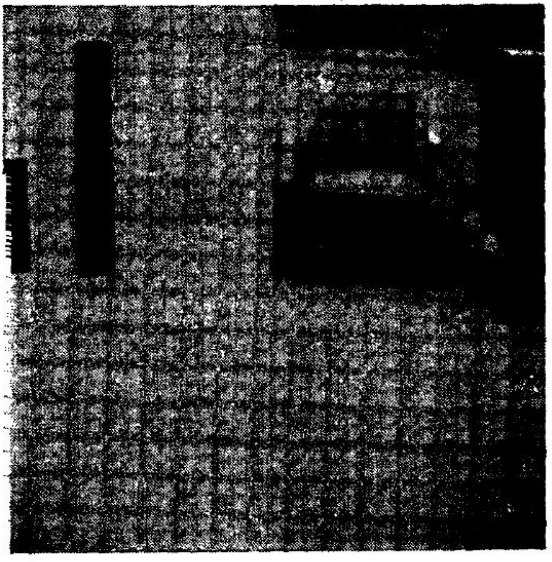


Рис. 8.4а. Изображение на телевизионном мониторе.

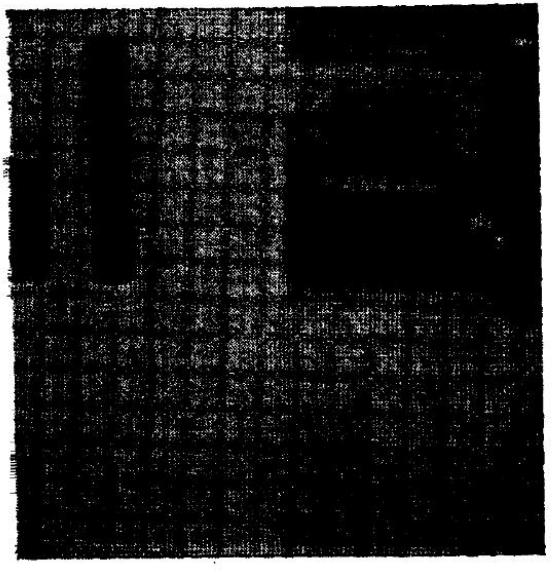


Рис. 8.4б. Дискретное изображение.

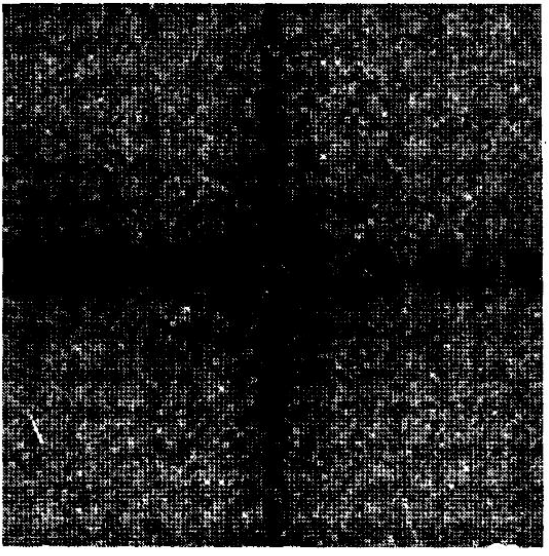


Рис. 8.4в. Логарифм модуля спектра Фурье.

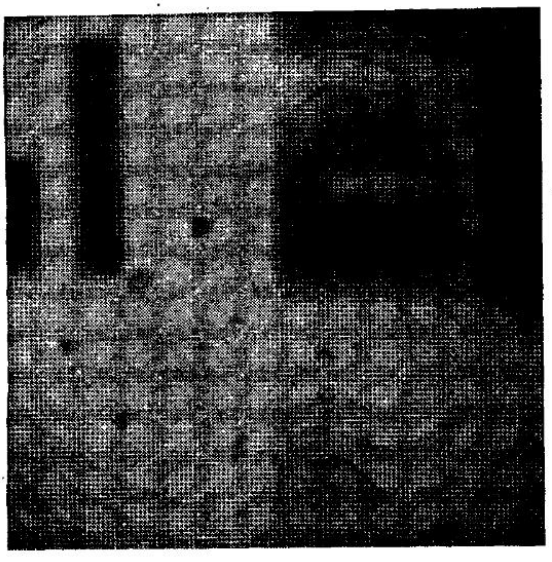


Рис. 8.4г. Результат низкочастотной фильтрации.



Рис. 8.4д. Результат высокочастотной фильтрации.

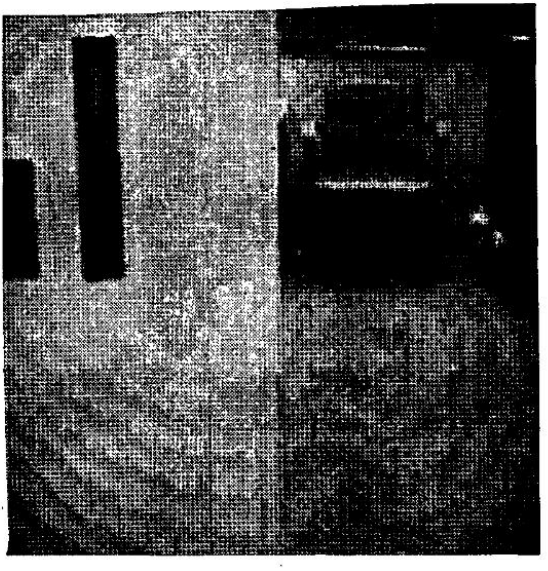


Рис. 8.4е. Результат операции подчеркивания высоких частот

светлой границей. Это явление обычно рассматривается как чрезмерное подчеркивание. Оно возникает, когда фильтруемое изображение содержит резкие разрывы. И наконец, на рис. 8. 4е показан результат применения фильтра для подчеркивания высоких частот, определяемого формулой (18).

Мы привели обе серии примеров лишь ради иллюстрации и не пытались оптимизировать эти фильтры в каком-либо смысле. Тем не менее мы должны подчеркнуть, что фильтрация с помощью преобразования Фурье не является универсальным средством для получения идеальных изображений. Скорее она представляет собой инструмент, применять который следует избирательно. По мнению многих исследователей, этот метод больше всего подходит в тех случаях, когда имеют дело с повторяющимися или периодическими изображениями, так как спектры Фурье связаны с разложением в ряд по экспоненциальным функциям, которые сами являются периодическими.

8.5. СРЕДНЕКВАДРАТИЧНАЯ ОЦЕНКА [1])

До сих пор мы обсуждали некоторые эвристические методы сглаживания изображений или повышения их резкости. В этом разделе мы хотим дать формальную постановку задачи создания таких методов с тем, чтобы изложить классические результаты Винера и Колмогорова по теории оптимальной оценки. Основной вопрос будет заключаться в том, как сформулировать требования к пространственному фильтру, который очищал бы изображение от шума «оптимальным» образом. Наше изложение будет по необходимости кратким; читателя, желающего ознакомиться с предметом более подробно, мы отсылаем к литературе, и в первую очередь к работам, перечисляемым в конце главы.

С самого начала будем считать, что функция интенсивности $g(x, y)$ может быть представлена в виде суммы

$$g(x, y)=s(x, y)+n(x, y),$$

где s представляет собой идеальное изображение или сигнал, а n— чисто «шумовое» изображение. Задача заключается в оценке сигнала s по реальному изображению g. Для того чтобы задача оценки была хорошо определена, примем, что и s, и g представляют собой случайные функции интенсивности. Выражаясь формально, мы будем считать, что для любого множества из m точек на плоскости изображения вектор $(s(x_1, y_1), \ldots, s(x_m, y_m))$ представляет собой векторную случайную величину со своим собственным законом распределения вероятностей. Пусть то же самое справедливо и для шума. Мы примем также, что среднее значение шума равно нулю, т. е.

[1]) Этот раздел при первом чтении может быть пропущен.

$E[n(x, y)]=0$ для всех точек (x, y). Мы хотим построить пространственный фильтр с импульсной реакцией $h(x, y)$ (или, что равносильно, с передаточной функцией $H(f_x, f_y)$), который на входе получал бы функцию $g(x, y)$, а на выходе давал некоторую функцию $\hat{s}(x, y)$, которая была бы «наилучшим» приближением идеального изображения $s(x, y)$. В качестве критерия оптимальности мы будем применять среднеквадратичную ошибку, и поэтому задача сводится к построению фильтра H, минимизирующего величину

$$E[(s(x, y)-\hat{s}(x, y))^2].$$

Прежде чем переходить к задаче минимизации, нам придется изложить некоторые предварительные сведения и дать ряд определений. Пусть даны две случайные функции интенсивности s и $\hat{s}$. Определим их *функцию взаимной корреляции* $C_{s\hat{s}}(x, y)$ формулой

$$C_{s\hat{s}}(x, y)=E[s(u, v)\,\hat{s}(u-x, v-y)].$$

Заметим, что между этим определением взаимной корреляции и предыдущим определением, введенным в связи с задачей сравнения с эталоном, существует сходство. В обоих случаях одна из функций смещается относительно другой и произведение соответственных значений «усредняется»: в предыдущем случае — суммированием по плоскости изображения, в настоящем случае — непосредственным вычислением математического ожидания. Если обе функции одинаковы (т. е. $\hat{s}=s$), функция C_{ss} называется *автокорреляционной функцией*. Результат преобразования Фурье, примененного к автокорреляционной функции C_{ss} случайной функции интенсивности s, называется *спектральной плотностью мощности* функции s и будет обозначаться далее как $P_{ss}(f_x, f_y)$. Этот термин правильно отражает смысл, поскольку можно показать, что интеграл функции P_{ss} по любой области на плоскости пространственных частот в точности равен доле мощности случайного изображения, содержащейся на этих пространственных частотах. По определению

$$P_{ss}(f_x, f_y)=\int_{-\infty}^{\infty}\int C_{ss}(x, y)\exp[-2\pi i(f_x x+f_y y)]\,dx\,dy.$$

Аналогично *взаимная спектральная плотность* двух случайных функций интенсивности s и $\hat{s}$ представляет собой результат преобразования Фурье для функции взаимной корреляции

$$P_{s\hat{s}}(f_x, f_y)=\int_{-\infty}^{\infty}\int C_{s\hat{s}}(x, y)\exp[-2\pi i(f_x x+f_y y)]\,dx\,dy.$$

Согласно обратной теореме,

$$C_{s\hat{s}}(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty}\int P_{s\hat{s}}(f_x, f_y) \exp[2\pi i (f_x x + f_y y)]\, df_x\, df_y.$$

Поэтому

$$C_{s\hat{s}}(0, 0) \triangleq E[s(u, v)\,\hat{s}(u, v)] = \int_{-\infty}^{\infty}\int P_{s\hat{s}}(f_x, f_y)\, df_x\, df_y.$$

Аналогично

$$C_{ss}(0, 0) \triangleq E[s^2(u, v)] = \int_{-\infty}^{\infty}\int P_{ss}(f_x, f_y)\, df_x\, df_y$$

и

$$C_{\hat{s}\hat{s}}(0, 0) \triangleq E[\hat{s}^2(u, v)] = \int_{-\infty}^{\infty}\int P_{\hat{s}\hat{s}}(f_x, f_y)\, df_x\, df_y.$$

Нам понадобится еще целый ряд результатов, прежде чем мы сможем заняться нашей задачей минимизации. Эти результаты устанавливают соотношения между взаимными спектральными плотностями входных и выходных сигналов фильтра; нам они необходимы, чтобы оценить эффект от действия фильтра. Мы приводим эти результаты без доказательства, но их легко получить непосредственно из определений (звездочка обозначает комплексно сопряженные величины)

$$P_{s\hat{s}}(f_x, f_y) = H^*(f_x, f_y) P_{sg}(f_x, f_y),$$
$$P_{\hat{s}s}(f_x, f_y) = H(f_x, f_y) P^*_{sg}(f_x, f_y),$$
$$P_{\hat{s}\hat{s}}(f_x, f_y) = H(f_x, f_y) H^*(f_x, f_y) P_{gg}(f_x, f_y).$$

Теперь, имея все эти результаты и пользуясь введенными ранее определениями, мы можем построить фильтр H, дающий наилучшую оценку исходного сигнала s. Поскольку мы собираемся минимизировать математическое ожидание квадрата ошибки, напишем

$$E[(s(x, y) - \hat{s}(x, y))^2] =$$
$$= E[s^2(x, y)] - E[s(x, y)\,\hat{s}(x, y)] - E[\hat{s}(x, y)\, s(x, y)] + E[\hat{s}^2(x, y)] =$$
$$= C_{ss}(0, 0) - C_{s\hat{s}}(0, 0) - C_{\hat{s}s}(0, 0) + C_{\hat{s}\hat{s}}(0, 0) =$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int [P_{ss}(f_x, f_y) - P_{s\hat{s}}(f_x, f_y) - P_{\hat{s}s}(f_x, f_y) + P_{\hat{s}\hat{s}}(f_x, f_y)]\, df_x\, df_y.$$

Используя наши соотношения для взаимных спектральных плотностей, получим (зависимость от f_x и f_y не указывается)

$$E[(s(x, y) - \hat{s}(x, y))^2] = \int_{-\infty}^{\infty}\int [P_{ss} - H^* P_{sg} - H P^*_{sg} + H H^* P_{gg}]\, df_x\, df_y.$$

Преобразуем подынтегральное выражение следующим образом:

$$E[(s(x, y)-\hat{s}(x, y))^2] =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int \left[P_{gg}\left(H-\frac{P_{sg}}{P_{gg}}\right)\left(H-\frac{P_{sg}}{P_{gg}}\right)^* - \frac{P_{sg}P_{sg}^*}{P_{gg}} + P_{ss}\right] df_x\, df_y.$$

При такой записи подынтегрального выражения становится очевидным, что минимум среднеквадратичной ошибки имеет место, когда передаточная функция H нашего фильтра принимает вид

$$H(f_x, f_y) = \frac{P_{sg}(f_x, f_y)}{P_{gg}(f_x, f_y)}.$$

Последняя формула описывает знаменитый винеровский фильтр.

В общем случае довольно трудно дать винеровскому фильтру какую-то качественную интерпретацию в первую очередь потому, что нет такого рода простой интерпретации для взаимной спектральной плотности. Ситуация становится значительно более приемлемой, если мы предположим, что среднее значение шума равно нулю и он не коррелирован с сигналом, т. е.

$$E[s(t)\, n(t-\tau)] = E[s(t)]\, E[n(t-\tau)] = 0.$$

В этом случае легко убедиться, что

$$P_{sg}(f_x, f_y) = P_{ss}(f_x, f_y)$$

и

$$P_{gg}(f_x, f_y) = P_{ss}(f_x, f_y) + P_{nn}(f_x, f_y).$$

Следовательно,

$$H(f_x, f_y) = \frac{P_{ss}(f_x, f_y)}{P_{ss}(f_x, f_y) + P_{nn}(f_x, f_y)}.$$

Смысл этой формулы нетрудно установить. Спектральная плотность случайного изображения, как мы упоминали выше, определяет величину его мощности, вносимую каждой из пространственных частот [1]). Следовательно, передаточная функция фильтра велика по модулю на тех пространственных частотах, на которых мощность сигнала велика по сравнению с мощностью шума. Передаточная функция достигает своей максимальной величины, равной единице, на тех частотах, на которых мощность шума равна нулю, и, наоборот, полностью подавляет частоты, на которых мощность сигнала равна нулю. Такое естественное толкование представляет собой, возможно, наиболее ценный результат теории винеровской фильтрации. Каждая пространственно-частотная составляющая умножается на коэффициент, значение которого лежит между нулем и еди-

[1]) Строго говоря, мощность, которая вносится всеми частотами, лежащими в малом прямоугольнике размером Δf_x на Δf_y, равна $P(f_x, f_y)\Delta f_x \Delta f_y$.

ницей. Вес, придаваемый каждой из частот, в точности равен доле мощности сигнала для этой пространственной частоты, отнесенной к суммарной мощности сигнала и шума для той же частоты. В качестве простой иллюстрации предположим, что по условию сигнал ограничен сверху по полосе частот до некоторой пространственной частоты W. Если известно, что шум содержит только пространственные частоты, превышающие W, то в соответствии как с математическим, так и с качественным толкованием сигнал лучше всего отделяется от шума посредством фильтра низких частот, пропускающего только частоты ниже W.

Родственным вопросом, представляющим интерес, является вопрос о синтезе фильтра, который дает наилучшую оценку производной функции интенсивности. На этот вопрос легко ответить, если под «производной» понимается ориентированная производная сигнала s вдоль некоторого направления на плоскости изображения. (В качестве особых случаев сюда входят, конечно, и частные производные по осям X и Y.) Можно показать, что наилучшая оценка ориентированной производной сигнала равна ориентированной производной наилучшей оценки сигнала. Другими словами, наилучшая оценка образуется в результате предварительной обработки заданной функции интенсивности g с помощью полученного выше винеровского фильтра и последующего дифференцирования его выходного сигнала. Такая простота, по существу, связана с тем, что операция взятия ориентированной производной является линейной, а фильтры класса, который мы рассматриваем, выполняют линейные операции над их входными сигналами.

С другой стороны, предположим, что мы хотим оценить величину модуля градиента сигнала. Нам было бы приятно сообщить, что эту оценку можно выполнить оптимальным образом простым взятием модуля градиента от винеровской оценки сигнала. К сожалению, в данном случае это не так: операция взятия модуля не является линейной. Такая процедура, однако, представляется «хорошим», а иногда даже и оптимальным методом оценки модуля градиента.

8.6. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Пространственная фильтрация представляет собой естественное обобщение традиционных одномерных, или временных, процессов фильтрации, используемых в сетях связи, на двумерный случай. Как в одномерном, так и в двумерном вариантах преобразование Фурье является средством фундаментальной важности; читатели, желающие углубить свое знакомство с этим вопросом, могут воспользоваться монографиями Эзилтайна (1958), Папулиса (1962) и Брэйсвелла (1965). В нашем введении в двумерное преобразование использована очень хорошо написанная книга Гудмэна (1968). Книга Эндрюса (1970) является единственным известным нам руко-

водством специально по методам преобразования в обработке изображений и содержит много хороших примеров такой обработки.

Как мы уже упоминали, для выполнения операции преобразования имеется много как хороших аналоговых, так и хороших цифровых методов. Аналоговые методы основаны на известной способности оптических систем, использующих когерентный свет, выполнять преобразование Фурье. Превосходное введение в эти методы можно найти в упомянутой выше книге Гудмэна. Другим хорошим источником информации по оптическим методам является сборник статей под редакцией Типпета и др. (1965). Розенфельд (1969) обсуждает большое число методов оптической обработки изображений и приводит богатый список литературы. Поппельбаум (1968) описывает оптический метод, позволяющий обойти обычное требование, чтобы изображение было задано в виде диапозитива.

Цифровая реализация преобразования Фурье стала возможной для большинства задач после того, как Кули и Тьюки (1965) разработали алгоритм, который теперь называется быстрым преобразованием Фурье (БПФ). Степень интереса к БПФ характеризует тот факт, что в течение трех лет по этому вопросу было два специальных выпуска трудов Института радиоинженеров по акустике[1]). Второй из этих выпусков содержит обширную библиографию. Вводные статьи по БПФ были написаны Джентльменом и Сэндом (1966), а также Брингхэмом и Морроу (1967). Синглтон (1967a, 1967b) обсуждает задачу вычисления больших спектров для случаев, когда размер спектра превосходит объем оперативной памяти. Синглтон (1968a, 1968b) приводит также процедуры на АЛГОЛе для выполнения БПФ. Пиз (1968) обсуждает модификацию БПФ для параллельной обработки.

Методы Фурье в обработке изображений применялись в первую очередь либо в задачах сравнения с эталоном, обсуждавшихся в разд. 8. 3, либо в задачах улучшения качества изображений, обсуждавшихся в разд 8. 4. Особенно хорошее описание применений оптики Фурье для сравнения с эталоном было выполнено Ван дер Люгтом и др. (1965). Многие исследователи, работавшие в области улучшения качества изображений, ограничили свое внимание задачей подготовки улучшенных изображений для облегчения работы человека-дешифровщика. Натан (1968) занимался подавлением различных специфических видов помех на телевизионных изображениях, переданных с космических аппаратов. Селзер (1968) применял много разновидностей пространственных фильтров, чтобы улучшить качество рентгенограмм. Оппенхейма и др. (1968) привлекало (наряду с другими вопросами) использование нелинейной фильтрации для улучшения качества изображений. Их метод со-

[1]) *IEEE Trans. on Audio and Electroacoustics*, AU-15, № 2 (June 1967); AU-17, № 2 (June 1969).

стоял в вычислении логарифма функции интенсивности, последующей обработке линейным фильтром и в выполнении преобразования, обратного логарифмированию, над результатом. Эндрюс (1969) рассмотрел семейство фильтров для обнаружения объекта. Журнал «Опознавание образов» посвятил вопросам улучшения качества изображений специальный выпуск [1]).

Некоторых исследователей привлекал прямой анализ спектра Фурье изображения. Холмс и др. (1965) решали задачу обнаружения приблизительно параллельных прямых линий, отыскивая выступающие пики модуля спектра. Лендэриса и Стэнли (1965, 1970) привлекала задача опознавания изображений посредством анализа их спектров.

Метод среднеквадратичной оценки, рассмотренный в разд. 8.5, представляет собой не что иное, как одну из ветвей статистической теории связи. Эта теория имеет дело с такими задачами, как обнаружение или оценка сигналов при наличии помех, и поэтому применима, по крайней мере в принципе, к задаче выделения «идеального» изображения из «зашумленного». Несмотря на такую потенциальную полезность, в этой области выполнено очень немного работ, что, возможно, связано с трудностями при выборе полезных статистических предположений. Читатели, заинтересованные в дальнейшем знакомстве с этой областью, захотят, возможно, обратиться к монографиям Папулиса (1965), Возенкрафта и Джэкобса (1967) и Сакрисона (1968).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Брингхэм, Моррoy (Bringham E. O., Morrow R. E.)
The fast Fourier transform, *IEEE Spectrum*, 4, 63—70 (December 1967).

Брэйсвелл (Bracewell R. N.)
The Fourier transform and its applications (McGraw-Hill, New York, 1965).

Ван дер Люгт и др. (Van der Lugt A. et al.)
Character-reading by optical spatial filtering, in Optical and Electro-Optical Information Processing, pp. 125—141, Tippett J. T. et al., eds., MIT Press, Cambridge, Mass., 1965.

Возенкрафт, Джэкобс (Wozencraft J. M., Jacobs I. M.)
Principles of Communication Engineering, John Wiley, New York, 1967. [Русский перевод: Возенкрафт Дж., Джэкобс И., Теоретические основы техники связи, «Мир», М., 1969.]

Гудмэн (Goodman J. W.)
Introduction to Fourier Optics (McGraw-Hill, New York, 1968). [Русский перевод: Гудмэн Дж., Введение в фурье-оптику, «Мир», М., 1970.]

Джентльмен, Сэнд (Gentleman W. M., Sande G.)
Fast fourier transforms — for fun and profit, Proc. FJCC, pp. 568—578, Spartan, Washington, D. C., 1966.

Кули, Тьюки (Cooley J. W., Tukey J. W.)
An algorithm for machine calculation of complex Fourier series, *Mathematics of computation*, 19, 297—301 (April 1965).

[1]) *Pattern Recognition*, 2, № 2 (May 1970).

Лендэрис, Стэнли (Lendaris G. G., Stanley G. L.)
An opticalogical self-organizing recognition system, in Optical and Electro-Optical Information Processing, pp. 535—550, Tippett J. T. et al., eds., MIT Press, Cambridge, Mass., 1965.

Лендэрис, Стэнли (Lendaris G. G., Stanley S. L.)
Diffraction-pattern sampling for automatic pattern recognition, *Proc. IEEE*, **58**, 198—216 (February 1970). [Русский перевод в журнале «Труды ИИЭР», **58**, № 2, 1970.]

Натан (Nathan R.)
Picture enhancement for the Moon, Mars and man, in Pictorial Pattern Recognition, pp. 239—266, Cheng G. C. et al., eds. (Thompson Book Company, Washington, D. C., 1968).

Оппенхейм и др. (Oppenheim A. V., et al.)
Nonlinear filtering of multiplied and convolved signals, *Proc. IEEE*, **56**, 1264—1291 (August 1968). [Русский перевод в журнале «Труды ИИЭР», **56**, № 8, 1968.]

Папулис (Papoulis A.)
The Fourier integral and its applications, McGraw-Hill, New York, 1962.

Папулис (Papoulis A.)
Probability, random variables and stochastic processes, McGraw-Hill, New York, 1965.

Пиз (Pease M. C.)
An adaptation of the fast Fourier transform for parallel processing, *J. ACM*, **15**, 252—264 (April 1968).

Поппельбаум (Poppelbaum W. J.)
Adaptive on-line Fourier transform, in Pictorial Pattern Recognition, pp. 387—394, G. C. Cheng et al., eds., Thompson Book Company, Washington, D. C., 1968.

Розенфельд (Rosenfeld A.)
Picture Processing by Computer, Academic Press, New York, 1969. [Русский перевод: Розенфельд А., Распознавание и обработка изображений, «Мир», М., 1972.]

Сакрисон (Sakrison D. J.)
Communication Theory: Transmission of waveforms and digital information, John Wiley, New York, 1968.

Селзер (Selzer R. H.)
The use of computers to improve biomedical image quality, *Proc. FJCC*, pp. 817—834 (December 1968).

Синглтон (Singleton R. C.)
A method for computing the fast Fourier transform with auxiliary memory and limited high-speed storage, *IEEE Trans. on Audio and Electroacoustics*, **AU-15**, 91—98 (June 1967a).

Синглтон (Singleton R. C.)
On computing the fast Fourier transform, *Comm. ACM*, **10**, 647—654 (October 1967b).

Синглтон (Singleton R. C.)
Algol procedures for the fast Fourier transform, Algorithm 338, *Comm. ACM*, **11**, 773—776 (November 1968a).

Синглтон (Singleton R. C.)
An Algol procedure for the fast Fourier transform with arbitrary factors, Algorithm 339, *Comm. ACM*, **11**, 776—779 (November 1968b).

Типпет, Беркович, Клапп, Костер, Вандербург (Tippett J. T., Berkowitz D. A., Clapp L. C., Koester C. J., Vanderburgh A., eds.)
Optical and Electro-optical Information Processing, MIT Press, Cambridge, Mass., 1965.

Холмс и др. (Holmes W. S. et al.)
Optical-electronic spatial filtering for pattern recognition, in Optical and Electro-

Optical Information Precessing, pp. 199—207, Tippett J. T. et al., eds., MIT Press, Cambridge, Mass., 1965.
Эзилтайн (Aseltine J. A.)
Transform Methods in Linear System Analysis, McGraw-Hill, New York, 1958.
Эндрюс (Andrews H. C.)
Automatic interpretation and classification of images by use of the Fourier domain, in Automatic Interpretation and Classification of Images, pp. 187—198, Grasselli A., ed., Academic Press, New York, 1969.
Эндрюс (Andrews H. C.)
Computer Techniques in Image Processing, Academic Press, New York and London, 1970.

Задачи

1. Выведите следующие фундаментальные свойства двумерного преобразования Фурье.

а) Теорема о линейности:

$$\mathcal{F}\{ag_1+bg_2\}=a\mathcal{F}\{g_1\}+b\mathcal{F}\{g_2\}$$

для любых подходящих для преобразования функций g_1 и g_2 и любых констант a и b.

б) Теорема о растяжении:
Если $\mathcal{F}\{g(x, y)\}=G(f_x, f_y)$, то

$$\mathcal{F}\{g(ax, by)\}=\frac{1}{|ab|}G\left(\frac{f_x}{a}, \frac{f_y}{b}\right).$$

в) Теорема Парсеваля:
Если $\mathcal{F}\{g(x, y)\}=G(f_x, f_y)$, то

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int |g(x, y)|^2\,dx\,dy=\int_{-\infty}^{\infty}\int |G(f_x, f_y)|^2\,df_x\,df_y,$$

где $|\cdot|^2$ обозначает квадрат модуля комплексной величины. Дайте физическую интерпретацию этой теоремы.

2. Объясните качественно, почему изображение на выходе линейного пространственного фильтра должно быть сверткой входного изображения с импульсной реакцией фильтра.

3. Предложите метод автоматической фокусировки камеры, основанный на преобразовании Фурье.

4. Докажите, что

$$P_{\hat{s}\hat{s}}(f_x, f_y)=|H(f_x, f_y)|^2 P_{gg}(f_x, f_y).$$

5. а) Запишите передаточную функцию наилучшего линейного фильтра для оценки величины сигнала, спектральная плотность мощности которого не перекрывает спектральную плотность мощности шума. (Рассмотрите только одномерный случай.) Запишите выражение для выходного сигнала фильтра через его импульсную реакцию.

б) При тех же условиях, что и в п. «а», запишите выражение для наилучшей оценки производной сигнала. Объясните качественно, почему эта оценка гармонирует с полученной из интуитивных соображений оценкой, которая обсуждалась в предыдущей главе и заключалась в вычитании усредненных значений функции интенсивности.

6. а) Произвольную функцию интенсивности $g(x, y)$ иногда записывают в виде $g(x, y)=I(x, y)\cdot r(x, y)$, где величина $I(x, y)$ представляет собой интенсивность

света, падающего на тот элемент трехмерного объекта, который соответствует точке изображения (x, y), а величина $r(x, y)$ обозначает коэффициент отражения этого элемента. Предположим, что освещенность при изменении (x, y) меняется медленно, а коэффициент отражения, представляющий собой свойство объектов и текстур, меняется быстро. Придумайте общий принцип построения нелинейного пространственного фильтра, который разделял бы составляющие, образованные освещенностью и отражательной способностью.

б) Предположим теперь, что нам нужно подчеркивать перепады интенсивности в изображении, связанные с отражательной способностью, и подавлять изменения, связанные с освещенностью. Предложите специальный фильтр для решения этой задачи, взяв за основу фильтр, полученный в п. «а».

Глава 9

ОПИСАНИЯ ЛИНИИ И ФОРМЫ

9.1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе мы хотим обсудить проблему описания линий и форм на изображениях. Задавшись такой целью, мы будем считать, что составные части изображения уже выделены в виде каких-то осмысленных образований. Задача заключается в том, чтобы разработать основы методов, позволяющих естественным образом описывать эти образования. Прежде чем обсуждать отдельные методы, мы должны сделать несколько предварительных замечаний о проблеме в целом.

Сам предмет исследований в автоматическом анализе сцен можно в некотором смысле трактовать как проблему описания линий и форм на изображениях. Наиболее важным упрощением в настоящей главе является предположение о том, что «смысловая» часть картинки уже выделена. Выражаясь более точно, наше предположение сводится к тому, что некоторое подмножество точек плоскости изображения, называемое *объектом*, уже определено в результате предыдущей обработки. В ходе нашего обсуждения мы будем говорить о различных видах объектов: об объектах, составленных из дискретных точек, об объектах, составленных из линий, и об объектах, составленных из областей. В каждом случае вид обсуждаемого объекта будет ясен из контекста. Так или иначе, предметом исследований в данной главе действительно является описание подмножеств точек в плоскости изображения.

Поскольку в этой главе мы будем иметь дело с проблемой описания объекта, скажем сначала несколько слов о задаче выделения объекта на произвольном изображении. Вопрос о том, как человек решает *задачу отделения объекта от фона*, много лет занимает психологов, особенно тех, кто занимается проблемой гештальта [1]). Результатом этих усилий не было создание какой-либо ясной и всеобъемлющей теории; более того, известны зрительные иллюзии, в которых кажется, что объект и фон время от времени меняются местами. Мы не должны поэтому ожидать открытия какого-то универсального и всюду применимого алгоритма выделения объекта. С другой стороны, существует много приемов, которые полезны в конкретных случаях. Многие простые приемы основаны на методах,

---

[1]) Восприятня формы.— *Прим. перев.*

обсуждавшихся в гл. 7. Простейший метод выделения объекта состоит, видимо, в сравнении исходного изображения с порогом: все точки изображения, интенсивность которых превосходит (или не превосходит) некоторый порог, объявляются принадлежащими объекту. Обобщение этого метода заключается в том, чтобы разделить шкалу полутонов на интервалы и объявить, что все точки изображения, интенсивности которых находятся в пределах одного интервала, принадлежат одному и тому же объекту. Другой метод выделения объекта основан на сравнении с порогом градиентного изображения и на получении таким путем контурного рисунка. Третий метод состоит в том, чтобы выполнить анализ областей и трактовать каждую область (или по крайней мере пытаться это сделать) как отдельный объект. Заметим, наконец, что каждая из этих операций может быть скомбинирована с теми операциями пространственной фильтрации, которые описывались в предыдущей главе. Так или иначе, мы проведем наше обсуждение, предполагая, что объект на изображении уже выделен. Для удобства мы будем рассматривать описания линий и описания более общих «форм» в разных разделах, хотя очевидно, что эти понятия перекрываются, когда мы говорим о толстых линиях или о составленных из линий формах.

9.2. ОПИСАНИЕ ЛИНИИ

В этом разделе мы рассмотрим различные способы описания линий или составленных из линий объектов. Общий подход будет заключаться в том, чтобы аппроксимировать объект одной или многими прямыми линиями (или, может быть, кривыми, которые описываются многочленами). Таким образом, имеются две задачи: как разбить исходный объект на сегменты и как подобрать линию для каждого сегмента. Мы будем обсуждать методы решения задач обоих видов, но должны сразу предупредить читателя, что в большинстве своем эти методы эвристические — они не облагорожены какой-либо лежащей в их основе теорией и должны применяться с разумной осторожностью. Мы начнем наше обсуждение со второй, более простой задачи и в связи с этим будем считать, что нам дано множество дискретных точек на плоскости (X, Y), которое мы хотим аппроксимировать одной линией. В следующих пунктах описываются два аналитических подхода к этой задаче.

9.2.1. ПОДБОР ЛИНИЙ ПО МИНИМУМУ СУММЫ КВАДРАТОВ ОШИБОК

Классический метод подбора линий состоит в отыскании одиночной линии, дающей минимальную сумму квадратов ошибок (МСКО). Говоря более точно, нам дано множество точек $\{(x_i, y_i)\}$, $i=1, \ldots, n$, лежащих на плоскости, и мы пытаемся отыскать два

таких числа c_0 и c_1, чтобы функция ошибки

$$\sum_{i=1}^{n} [(c_0 + c_1 x_i) - y_i]^2$$

была минимальна. Другими словами, мы хотим найти такую прямую линию, чтобы сумма квадратов расстояний по вертикали от каждой из точек до этой линии была минимальна. Эта задача и другие задачи такого типа могут быть элегантно решены посредством псевдообращения матрицы. В гл. 5 псевдообратная матрица была получена чисто аналитическими методами. Потратим некоторое время, чтобы для разнообразия получить тот же результат геометрически.

Пусть дано матричное уравнение

$$A\mathbf{u} = \mathbf{b}.$$

Если мы обозначим через $\mathbf{a}^i$, $i = 1, \ldots, k$, столбцы матрицы A, а через u_i составляющие вектора $\mathbf{u}$, то обычная интерпретация этого уравнения будет заключаться в том, что величины u_i представляют собой весовые коэффициенты, которые используются при суммировании в линейной комбинации столбцов матрицы A, в результате чего получается данный вектор $\mathbf{b}$:

$$\sum_{i=1}^{k} u_i \mathbf{a}^i = \mathbf{b}.$$

Если вектор $\mathbf{b}$ лежит внутри линейной оболочки, образованной столбцами матрицы A, уравнение, конечно, имеет решение. Предположим, однако, что вектор $\mathbf{b}$ лежит вне линейной оболочки векторов $\{\mathbf{a}^i\}$. В этом случае мы можем лишь пытаться найтн «наилучшее приближение» к вектору $\mathbf{b}$, какое только существует в пределах линейной оболочки векторов $\mathbf{a}^i$. А именно мы можем искать такие коэффициенты u_i или такой вектор $\mathbf{u}$, чтобы величина $\|A\mathbf{u} - \mathbf{b}\|^2$ была минимальна. Ясно, что наилучшая оценка будет получена в случае, когда вектор ошибки $(\mathbf{b} - A\mathbf{u})$ ортогонален линейной оболочке векторов $\{\mathbf{a}^i\}$. Рис. 9.1 иллюстрирует эту ситуацию для случая, когда матрица A содержит только два трехмерных столбца и вектор $\mathbf{b}$ лежит вне их линейной оболочки. Обозначим через $\mathbf{u}^*$ оптимальный взвешивающий вектор, и тогда величина $A\mathbf{u}^*$ будет наилучшим приближением к $\mathbf{b}$, какое только может быть найдено внутри линейной оболочки векторов $\{\mathbf{a}^i\}$. Запишем условие ортогональности вектора $(\mathbf{b} - A\mathbf{u}^*)$ столбцам матрицы A следующим образом:

$$A^t(\mathbf{b} - A\mathbf{u}^*) = 0,$$

или

$$A^t\mathbf{b} = A^tA\mathbf{u}^*.$$

Теперь, если матрица A^tA имеет обратную, мы можем решить уравнение относительно $\mathbf{u}^*$ и при этом получим

$$\mathbf{u}^* = (A^tA)^{-1}A^t\mathbf{b} = A^\dagger\mathbf{b}.$$

Матрица $A^\dagger = (A^tA)^{-1}A^t$ называется *псевдообратной* по отношению к матрице A. Заметим, что если матрица A обратима, то $A^\dagger = A^{-1}$. Прежде чем покончить с псевдообращением, мы должны показать, что матрица (A^tA) имеет обратную. В общем случае эта матрица обратима, если столбцы матрицы A линейно независимы, и в этом

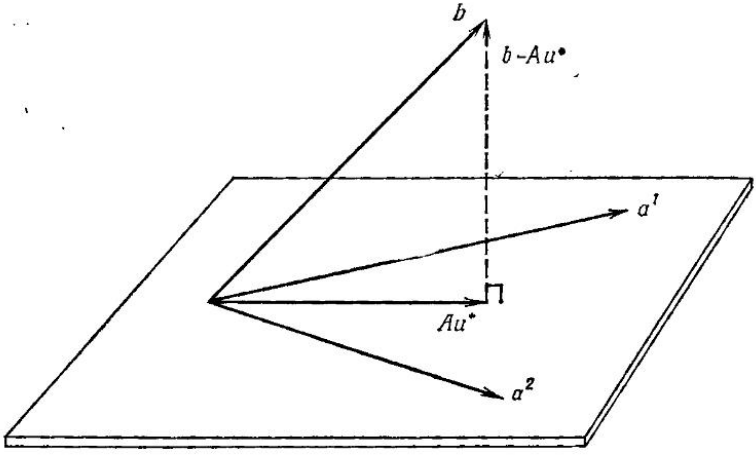


Рис. 9.1. Аппроксимация по минимуму суммы квадратов ошибок.

можно убедиться следующим простым рассуждением. Всякая матрица обратима, если ее обнуляющий множитель равен нулю, т. е., в нашем случае, если из равенства $(A^tA)\mathbf{v}=0$ следует, что вектор $\mathbf{v}$ сам равен нулю. Предположим противное: пусть $\mathbf{v}\neq 0$. Поскольку столбцы матрицы A считаются линейно независимыми, из этого следует, что $A\mathbf{v}\neq 0$. Тогда матричное произведение $A^t(A\mathbf{v})$ можно интерпретировать как вектор, составленный из скалярных произведений столбцов матрицы A на вектор $A\mathbf{v}$. Поскольку $A\mathbf{v}$ представляет собой не равный нулю вектор, лежащий в линейной оболочке столбцов матрицы A, он не может быть ортогонален всем столбцам. Следовательно, все скалярные произведения не могут быть равны нулю, т. е. $A^tA\mathbf{v}\neq 0$. Это противоречит предположению, а, следовательно, обнуляющий множитель матрицы A^tA есть нулевой вектор, и эта матрица обратима.

Подведем итоги обсуждению вопросов, связанных с псевдообращением. Предположив, что столбцы матрицы A линейно независимы, мы нашли, что величина $||A\mathbf{u}-\mathbf{b}||^2$ минимальна при $\mathbf{u}=A^\dagger\mathbf{b}$. Вернемся теперь к нашей исходной задаче подбора линий. Предпо-

ложим, что мы взяли наше множество точек $\{(x_i, y_i)\}$ и записали в форме $A\mathbf{u}=\mathbf{b}$ следующее матричное уравнение:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}}.$$

Если мы возьмем вектор $\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}$ равным $A^\dagger \mathbf{b}$, то можем быть уверены, что величина $\|A\mathbf{u}-\mathbf{b}\|^2$ минимальна [1]). Но

$$\|A\mathbf{u}-\mathbf{b}\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} c_0+c_1x_1 \\ c_0+c_1x_2 \\ \vdots \\ c_0+c_1x_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \right\|^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} [(c_0+c_1x_i)-y_i]^2,$$

что представляет собой в точности критерий МСКО для коэффициентов c_0 и c_1 наилучшей линии. Следовательно, решение, соответствующее МСКО, получается умножением вектора $\mathbf{b}$, составленного из значений координат Y, на матрицу, псевдообратную матрице A, составленной из значений координат X:

$$\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = A^\dagger \mathbf{b}.$$

Подход на основе псевдообращения может быть легко распространен на случай аппроксимации множества точек по критерию МСКО с помощью многочлена. Пусть мы хотим найти такие коэффициенты $c_0, c_1, \ldots, c_d$, при которых сумма

$$\sum_{i=1}^{n} [(c_0+c_1x_i+c_2x_i^2+\ldots+c_dx_i^d)-y_i]^2$$

минимальна. Мы будем поступать так же, как и в линейном случае, но на этот раз запишем матрицу A для значений координат X в виде

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \ldots x_1^d \\ & \vdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 \ldots x_n^d \end{bmatrix},$$

[1]) Заметим, что столбцы A линейно зависимы тогда и только тогда, когда $x_1=x_2=\ldots=x_n$.

а вектор $\mathbf{u}$ в виде

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_d \end{bmatrix}.$$

Положив $\mathbf{u} = A^{\dagger}\mathbf{b}$, мы сразу же найдем такие коэффициенты $c_0, c_1, \ldots, c_d$, при которых величина

$$\| A\mathbf{u} - \mathbf{b} \|^2 = \sum_{i=1}^{n} [(c_0 + \ldots + c_d x_i^d) - y_i]^2$$

минимальна.

9.2.2. ПОДБОР ЛИНИИ ПО СОБСТВЕННОМУ ВЕКТОРУ

Можно получить хороший аналитический способ аппроксимации множества точек прямой линией, если изменить слегка определение «наилучшего» подбора, использованное в методе МСКО. А именно будем считать, что линия аппроксимирует множество точек наилучшим образом, если при этом минимальна сумма квадратов расстояний по перпендикуляру от точек до линии. По некоторым причинам, которые вскоре прояснятся, мы будем называть эту линию наилучшим *приближением по собственному вектору*. Различие между определениями иллюстрируется рис. 9.2, на котором метод МСКО выбрал бы линию, минимизирующую сумму квадратов длин вертикальных сплошных отрезков, в то время как метод, который будет обсуждаться в данном пункте, минимизировал бы сумму квадратов длин пунктирных отрезков. Таким образом, подбор по собственному вектору в противоположность подбору по МСКО не зависит от выбора осей координат.

Введем несколько обозначений. Как обычно, положим, что дано множество из n точек $\{(x_i, y_i)\}$, $i = 1, \ldots, n$, которое надлежит аппроксимировать прямой линией. Мы будем рассматривать i-ю точку (x_i, y_i) как вектор $\mathbf{v}_i$, а расстояние по перпендикуляру от $\mathbf{v}_i$ до линии обозначим через d_i. (Таким образом, при заданном множестве точек d_i есть функция от этой линии. В данный момент мы не будем вводить явного обозначения этой зависимости.) Наша задача состоит в отыскании линии, минимизирующей сумму $d^2 = \sum_{i=1}^{n} d_i^2$.

Вывод уравнения для наилучшей линии значительно упростится, если мы сразу же установим тот факт, что линия, минимизирующая d^2, должна проходить через среднее (т. е. центр тяжести) точек $\{(x_i, y_i)\}$. Это можно легко показать следующими доводами. Предположим, что мы нашли линию, минимизирующую d^2. Введем новую систему координат (U, W), такую, что ось W параллельна наилуч-

шей линии. Пусть (u_i, w_i) — координаты точки (x_i, y_i) в систем (U, W). В этой системе уравнение наилучшей линии имеет вид $u=u_0$ где u_0 — некоторая константа; квадрат расстояния от i-й точки до

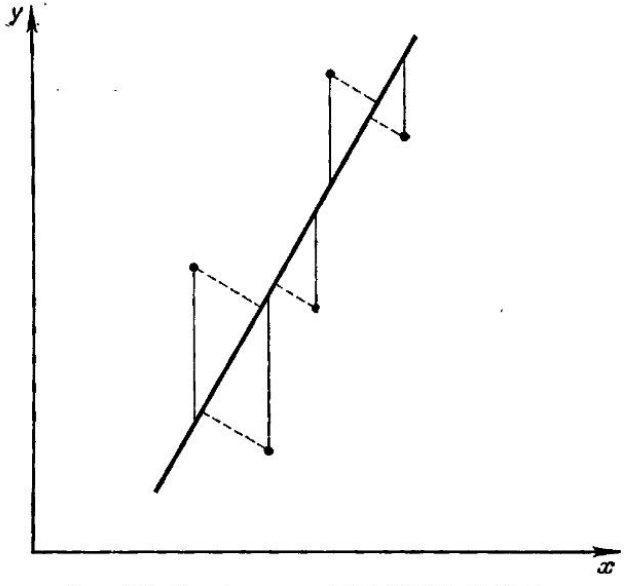


Рис. 9.2. Два критерия наилучшего подбора.

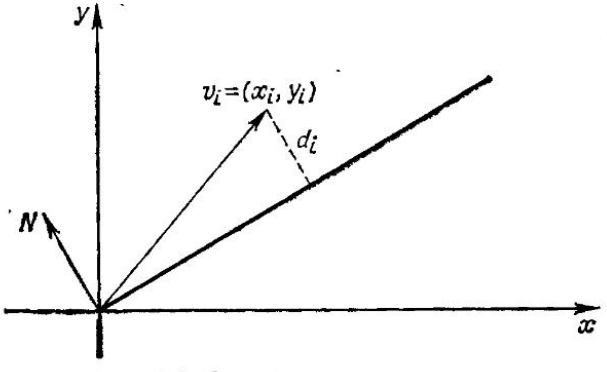


Рис. 9.3. Способ представления линии.

наилучшей линии равен $(u_i-u_0)^2$. Элементарные вычисления показывают, что величина d^2 минимальна, если u_0 представляет собой среднее значение координат U для n точек. Поэтому наилучшая линия проходит через центр тяжести, и, так как его положение не зависит от системы координат, наше первоначальное утверждение доказано.

В силу доводов, приведенных выше, мы можем на тех же основаниях предположить, что множество из n заданных точек имеет нулевое среднее. Наша задача теперь формулируется следующим образом: для данного множества точек с нулевым средним найти наилучшую прямую линию, проходящую через начало координат и минимизирующую величину d^2. Пусть прямая, проходящая через начало координат, задается с помощью единичного нормального вектора $\mathbf{N}$ (как показано на рис. 9.3). Тогда, обозначая явно зависимость от $\mathbf{N}$, получим

$$d_i^2(\mathbf{N}) = (\mathbf{N}\cdot\mathbf{v}_i)^2 = (\mathbf{N}^t\mathbf{v}_i)^2,$$

$$\begin{aligned} d^2(\mathbf{N}) &= \sum_{i=1}^{n} d_i^2(\mathbf{N}) = \\ &= \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{N}^t\mathbf{v}_i)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{N}^t\mathbf{v}_i)(\mathbf{v}_i^t\mathbf{N}) = \\ &= \mathbf{N}^t \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i^t)\,\mathbf{N}. \end{aligned}$$

Симметричная матрица

$$S \stackrel{\Delta}{=} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{v}_i\mathbf{v}_i^t$$

представляет собой матрицу рассеяния заданных n точек. Тогда наилучшая прямая определяется единичным нормальным вектором $\mathbf{N}$, минимизирующим величину

$$d^2(\mathbf{N}) = \mathbf{N}^t S\mathbf{N}.$$

Мы предоставляем читателю доказать в качестве упражнения, что в случае, когда $\|\mathbf{N}\| = 1$, эта квадратичная форма достигает минимума, если вектор $\mathbf{N}$ является собственным вектором матрицы S, относящимся к наименьшему собственному значению. Поскольку различные собственные векторы симметричных матриц ортогональны, прямая наилучшего приближения совпадает по направлению с главным собственным вектором матрицы S, т. е. с собственным вектором, относящимся к наибольшему собственному значению. Тогда наши правила подбора наилучшей прямой сводятся к следующему:

1) Привести точки к стандартному виду вычитанием среднего значения из координат каждой точки.

2) Найти главный собственный вектор матрицы рассеяния для множества стандартизованных точек.

3) Линией наилучшего приближения является единственная прямая, проходящая через среднее множества точек и параллельная этому собственному вектору.

На рис. 9.4 приведен интересный пример, показывающий, насколько различными могут быть приближения, полученные по МСКО и по собственному вектору. Приближение по собственному вектору представляет собой как раз ту прямую, какую можно было бы заранее пожелать, а вариант, полученный по МСКО, настолько «не-

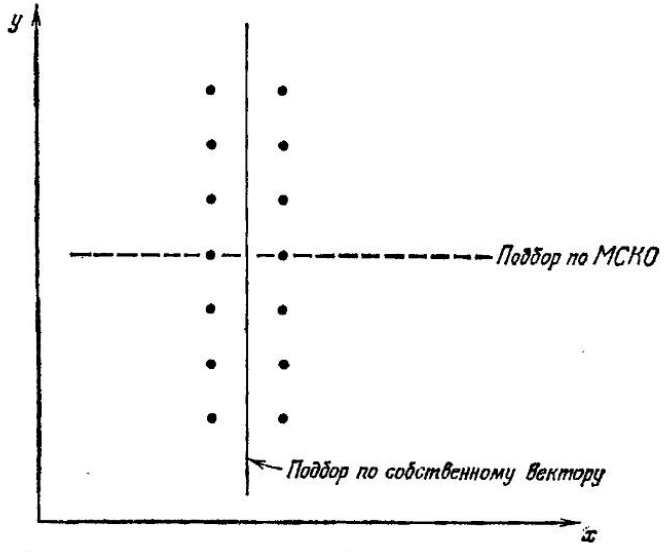


Рис. 9.4. Два различных варианта подбора для одного и того же множества точек.

верен», насколько это возможно. Такой слабый результат вызван только данной системой координат. Если поменять местами оси X и Y, то приближения, полученные по собственному вектору и по МСКО, будут полностью идентичны.

В заключение нашей дискуссии об аппроксимации по МСКО и по собственному вектору отметим, что оба метода основаны на аналитическом решении задачи минимизации некоторого критерия наилучшего приближения. При работе с дискретными изображениями во многих случаях желательно применение других критериев, которые не поддаются аналитическим методам [1]). Часто удается минимизировать такой критерий методом поиска, при условии, конечно, что для поиска можно легко найти хорошую начальную точку. Пред-

[1]) Один из таких критериев устанавливает нулевой штраф, если точка находится на расстоянии меньше ε от аппроксимирующей линии, и единичный штраф — в противном случае.

положим в качестве примера, что мы аппроксимируем множество точек посредством простого соединения крайней левой и крайней правой точек множества. Для дискретного изображения мы можем попробовать перемещать эти концевые точки в пределах небольшой области окрестных элементов с тем, чтобы минимизировать наш критерий. Такие перемещения можно выполнять путем перебора или с помощью какого-либо алгоритма поиска экстремума. Таким образом, основная стратегия минимизации некоторого критерия наилучшего приближения может использоваться даже в том случае, когда аналитическое решение невозможно.

9.2.3. ПОДБОР ЛИНИЙ ПОСРЕДСТВОМ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА

Ранее мы полагали, что все точки объекта должны аппроксимироваться единственной линией. Обратим теперь наше внимание к более общей задаче описания объекта посредством совокупности линий. А именно это означает, что мы должны уметь разделять объект на такие подмножества, что каждое из них может быть хорошо представлено единственной линией. Существует много методов для выполнения этой операции. В следующих пунктах описываются два метода, основанные на кластерном анализе. Идея, лежащая в основе каждого из них, заключается в том, чтобы перевести исходный объект в новое пространство, в котором коллинеарные подмножества объекта образуют группы или кластеры. Эти кластеры затем могут быть найдены, например, с помощью методов кластерного анализа, подобных описанным в гл. 6.

9.2.3.1. Преобразование точек в кривые

Предположим, как обычно, что нам дано множество из n точек объекта $\{(x_i, y_i)\}$, $i=1, \ldots, n$, которое мы хотим аппроксимировать некоторым еще нуждающимся в определении числом прямых линий. Один класс методов связан с переводом каждой точки (x_i, y_i) в некоторую кривую в новом *пространстве параметров* таким образом, чтобы коллинеарные точки превращались в пересекающиеся кривые. Если несколько кривых пересекаются, их общая точка определяет в некоторой системе параметров уравнение прямой линии на плоскости (X,Y), содержащей коллинеарные точки.

Конкретный пример методов этого класса будет задан, если мы введем систему параметров для семейства прямых линий. По некоторым причинам, объясняемым ниже, мы выберем так называемую *нормальную систему параметров* прямой линии. Как показано на рис. 9.5, такая система параметров задает прямую линию углом наклона θ ее нормали и ее расстоянием ρ от начала координат. Нетрудно убедиться, что уравнение прямой линии при таком пред-

ставлении выглядит следующим образом:

$$x \cos \theta + y \sin \theta = \rho.$$

В соответствии с этим мы переводим каждую точку (x_i, y_i) в кривую на плоскости (θ, ρ), определяемую уравнением

$$\rho = x_i \cos \theta + y_i \sin \theta.$$

Заметим, что это преобразование сводится всего лишь к тому, что мы иначе интерпретируем те же величины: мы считаем величины (x_i, y_i) фиксированными, а величины (θ, ρ) — переменными. Если у нас есть несколько точек (x_i, y_i) на плоскости (X, Y), лежащих на прямой $x \cos \theta_0 + y \sin \theta_0 = \rho_0$, то соответствующие им кривые на плоскости (θ, ρ) должны проходить через точку (θ_0, ρ_0). Выражаясь формальным языком, для нашего преобразования образ точки (x_i, y_i) есть кривая

$$\rho = x_i \cos \theta + y_i \sin \theta,$$

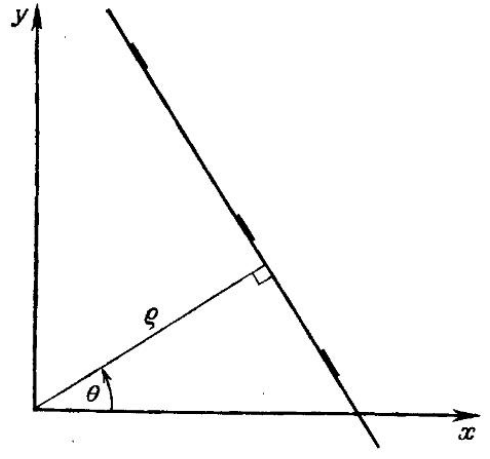


Рис. 9.5. Нормальная система параметров прямой линии.

или, поскольку точка (x_i, y_i) лежит на линии, определяемой параметрами (θ_0, ρ_0),

$$\rho = x_i \cos \theta + \left[\frac{\rho_0 - x_i \cos \theta_0}{\sin \theta_0}\right] \sin \theta.$$

Но последнее равенство справедливо при $\theta = \theta_0$ и $\rho = \rho_0$, поэтому образы всех коллинеарных точек (x_i, y_i) проходят через точку (θ_0, ρ_0).

В принципе описанный метод решает проблему аппроксимации множества заданных точек набором прямых линий. На практике, однако, возникают две трудности. Во-первых, если мы начинаем обработку n точек, то должны решить приблизительно $n^2/2$ уравнений, чтобы найти все пересечения. Во-вторых, можно предвидеть заранее, что из-за шумов точки подмножеств будут коллинеарны лишь с некоторым приближением, и, следовательно, их образы будут пересекаться в одной точке лишь приближенно. Можно уменьшить обе эти трудности, если квантовать параметры θ и ρ и провести обработку с помощью двумерного массива счетчиков на плоскости (θ, ρ). Для каждой точки исходного объекта соответствующая (кван-

тованная) кривая заносится в массив посредством увеличения содержимого счетчиков в каждой клетке вдоль кривой. Коллинеарные точки создадут в результате большие числа в некоторых счетчиках. Приближенно коллинеарные точки создадут моды в двумерной гистограмме, отображаемой массивом. Заметим, кстати, что нам нужно рассматривать значения θ только от 0 до 2π, а значения ρ от 0 до величины максимального диаметра сетчатки. Более того, метод изотропен в том смысле, что он не чувствителен к ориентации координатных осей. Эти качества представляют собой важное свойство нормальной системы параметров прямой линии, и они делают такую систему более удобной, чем, скажем, известный способ представления прямой через наклон и точку пересечения с осью координат. Другие сведения о нормальной форме прямой линии мы получим позже, когда будем обсуждать интегральные геометрические методы.

9.2.3.2. Кластерный анализ сегментов

Мы расширим временно основные правила подбора линий с тем, чтобы включить задачу подбора линий для совокупности коротких (как правило) прямых сегментов. Довод в пользу такой постановки заключается в том, что иногда изображение преобразуется в набор коротких прямых сегментов посредством операции сравнения с эталоном. В таком случае следующий очевидный шаг может состоять в аппроксимации коллинеарных сегментов прямыми линиями. Ключ к тому, как это можно было бы сделать, дает специальный способ представления сегментов, показанный на рис. 9.5. Мы будем представлять данный сегмент в координатах (θ, ρ), где ρ — длина вектора, проведенного из начала координат по нормали к прямой, содержащей сегмент, а θ — угол наклона этой нормали относительно оси X. Мы сразу же видим, что такой способ представления сегментов неоднозначен. В самом деле, все коллинеарные сегменты дадут одни и те же координаты (θ, ρ). Это наводит на мысль, что почти коллинеарные сегменты могут быть найдены посредством представления каждого из них в виде точки на плоскости (θ,ρ) и выделения кластеров для этих точек. Один из недостатков этого метода состоит в том, что он также чувствителен к выбору координатных осей на плоскости изображения. Если сегмент расположен далеко от начала координат, небольшая ошибка в определении его ориентации приводит к большой ошибке в определении его координаты ρ.

9.2.4. СЕГМЕНТАЦИЯ ЛИНИИ

В некоторых случаях задача разбиения объекта на подмножества может рассматриваться как задача сегментации. Мы, например, имеем основания ожидать, что точки объекта скорее лежат на ка-

ких-то (возможно, сложных) кривых, чем на случайно расположенных линейных сегментах. В таких случаях естественно поискать методы для разбиения совокупности точек объекта, т. е. кривой, на некоторое число последовательных линейных сегментов, таких, что каждый из них может быть хорошо аппроксимирован отрезком прямой. В следующих пунктах описываются два весьма простых метода осуществления этой операции.

9.2.4.1. Итеративный подбор концевых точек

В своей простейшей форме метод итеративного подбора концевых точек заключается в следующем. Нам дано, как обычно, множество из n точек, и мы проводим первую линию, например линию AB, соединяя просто концевые точки множества [1]). Вычисляются рас-

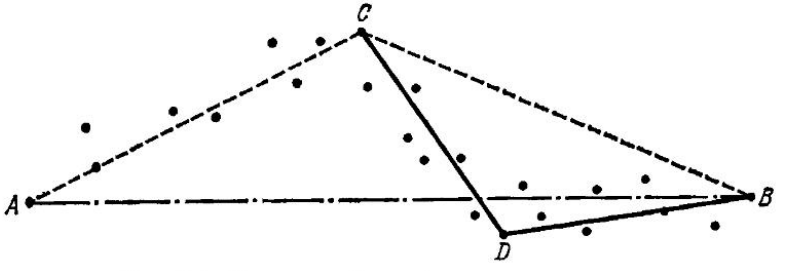


Рис. 9.6. Итеративный подбор концевых точек.

стояния от каждой точки до этой линии, и, если все они меньше некоторого установленного заранее порога, процесс закончен. Если это не так, мы находим точку, наиболее удаленную от AB, например точку C, и заменяем первоначальную линию двумя новыми линиями AC и CB. Этот процесс затем повторяется отдельно для двух новых линий, возможно, с различными порогами. Рис. 9.6 иллюстрирует этот метод. Исходная линия AB разбивается на AC и CB, а затем линия CB разбивается на CD и DB. Конечным результатом является последовательность связанных сегментов AC, CD и DB.

Метод имеет два недостатка, причем оба они сводятся к тому, что на результат сильно влияют отдельные точки. Первый, менее существенный недостаток заключается в том, что сегмент, выбираемый в конечном итоге, может оказаться не самой лучшей аппроксимацией точек, находящихся в его непосредственном окружении. С этим можно бороться с помощью процесса вторичного подбора, в

[1]) Концевыми точками могут быть крайняя левая и крайняя правая точки множества, крайняя верхняя и крайняя нижняя или другие пары различающихся точек.

котором для уточнения позиций сегментов линии используется более изощренный алгоритм. Другими словами, итеративный алгоритм можно применять для приближенного подбора и приближенного определения точек излома, а затем улучшать аппроксимацию во время второго прохода. Более серьезный недостаток итеративного процесса заключается в том, что единственная «дикая» точка может резко изменить конечный результат. Хотя с этим также можно бороться, например с помощью процесса предварительного сглаживания, та же самая основная проблема встречается и во многих других алгоритмах обработки изображений. Простота часто достигается ценой принятия решения на основании только локальной информации об изображении. Поэтому область применения простых алгоритмов ограничена случаями, когда исходные данные в основном не содержат шумов.

9.2.4.2. Точки максимальной кривизны

Нам хотелось бы рассмотреть здесь задачу сегментации несколько иного рода. Пусть задан гладкий контур (он может быть получен, например, с помощью процедуры прослеживания контура). В чем может заключаться разумный способ разбиения этой кривой на последовательные прямолинейные отрезки? Один способ, подсказанный психологическими экспериментами, состоит в том, чтобы разбить кривую в точках высокой кривизны и соединить точки излома прямыми линиями. Ценность этого метода подтверждается известным рисунком, принадлежащим Аттниву [1]), который построен в соответствии с описанным правилом (рис. 9.7). Мало кто не узнает здесь спящую кошку. С математической точки зрения такой подход связан с так называемым *естественным уравнением* кривой. Естественное уравнение кривой [2]) определяет ее кривизну как функцию длины дуги. Следовательно, обсуждаемый метод, по существу, эквивалентен заданию естественного уравнения кривой ее экстремальными точками. (Мы оставили без внимания некоторые математические трудности, связанные с определением кривизны в точке пересечения двух прямых линий.)



Рис. 9.7. Пример Аттнива (из книги Аттнива, 1954).

---

[1]) F. Attneave, «Some informational aspects of visual perception», *Psychol. Rev.*, 61, 183—193 (1954).

[2]) В отечественной литературе принят термин «уравнение в естественных координатах».— *Прим. перев.*

9.2.5. ЦЕПНОЕ КОДИРОВАНИЕ

Весьма удобный метод представления произвольной кривой известен под названием *цепного кодирования*. Ради простоты мы будем считать, что кривая первоначально задана в виде двухградационного изображения на неквантованной плоскости и что мы хотим каким-то образом представить ее в цифровой форме. Вместо того чтобы дискретизировать все изображение обычным путем, мы

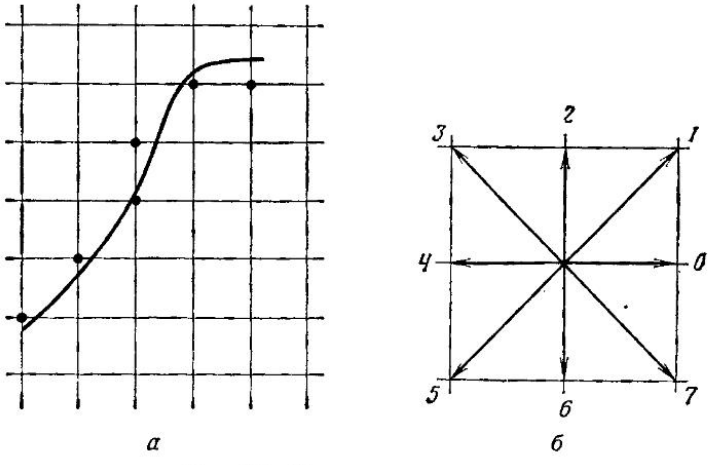


Рис. 9.8. Цепное кодирование.

наносим сетку на аналоговую картинку и фиксируем точки, в которых кривая пересекает линии сетки. Для представления кривой отбираются узлы сетки, ближайшие к каждому пересечению. Рис. 9.8, *а* показывает выделенные узлы для данной кривой. Затем мы кодируем последовательность узлов восьмеричными числами, обозначая направления от одного узла к другому в соответствии с кодами, показанными на рис. 9.8, *б*. Так, например, цепное кодирование данной кривой начиная с крайней нижней точки дает последовательность 1, 1, 2, 1, 0. Заметим, что такая схема может рассматриваться как дискретный вариант естественного уравнения кривой. Код определяет угол (в другом варианте — изменение угла) как функцию длины дуги с учетом того, что диагональные отрезки в $\sqrt{2}$ раз длинней, чем вертикальные и горизонтальные.

Цепное кодирование особенно удобно при сравнении формы двух кривых. Предположим для простоты, что мы хотим измерить сходство между двумя кривыми одинаковой длины и ориентации. Обозначим цепи через $a=a_1, \ldots, a_n$ и $b=b_1, \ldots, b_n$. Определим *цепную взаимно-корреляционную функцию* C_{ab} двух кривых с по-

мощью выражения

$$C_{ab} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{a_i b_i},$$

где

$$\overline{a_i b_i} \triangleq \cos(\angle a_i - \angle b_i).$$

Заметим, что, если две кривые идентичны, их цепная функция взаимной корреляции достигает своего максимального значения, равного 1. В более общем случае две цепи имеют разную длину, и нам будет нужно двигать одну цепь относительно другой с тем, чтобы найти наилучшее соответствие. В связи с этим мы обобщим определение цепной функции взаимной корреляции следующим образом:

$$C_{ab}(j) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{n} \overline{a_i b_{i+j}},$$

где k — длина общего участка двух последовательностей. Таким образом, наилучшее соответствие достигается вычислением величины $C_{ab}(j)$ для всех значений сдвига j и выбором максимальной из них. Главное ограничение эффективности цепной функции взаимной корреляции связано с тем, что обе кривые должны иметь одинаковый масштаб и ориентацию. Если хотя бы одно из этих условий нарушается, то либо следует отвергнуть этот метод, либо нужно повернуть на плоскости одну из последовательностей и (или) изменить ее масштаб относительно другой.

9.3. ОПИСАНИЕ ФОРМЫ

Займемся теперь проблемой описания формы объекта. Как обычно, будем полагать, что объект отделен от фона; следовательно, как и в случае описания линий, задача заключается в том, чтобы охарактеризовать некоторые подмножества плоскости (квантованной, возможно, с помощью прямоугольной сетки). Прежде чем пуститься в обсуждение конкретных методов, отвлечемся на время и рассмотрим несколько более тщательно понятие «описание».

Пусть нам дано произвольное подмножество плоскости и требуется описать его. Математически полное описание должно указывать для каждой точки плоскости, принадлежит ли она этому подмножеству. Если мы имеем дело с дискретными изображениями и, следовательно, с квантованной плоскостью, ситуация становится несколько проще: мы можем, например, перечислить все точки изображения, принадлежащие объекту. Тем не менее полное перечисление точек объекта противоречит нашему интуитивному ощущению, что описание некоторого сложного предмета должно быть в каком-то смысле проще, чем сам описываемый предмет. Другой метод описания объекта связан с его опознаванием в качестве элемента неко-

торого хорошо известного или описанного ранее класса. Мы можем например, описать данный объект как параллелограмм. Если инте ресующие нас объекты и в самом деле являются членами простых легко опознаваемых классов, такой подход может успешно приме няться. В более общем случае, однако, он никак вопроса не решает поскольку опознавание объектов само по себе является одной из целей анализа сцены. Следовательно, нас интересуют в первую очередь методы, которые дают более простое описание объекта, чем перечисление его точек, но в то же время не связаны с его опознаванием в качестве элемента некоторого класса.

Даже после того, как мы исключили очень явные виды описаний, упомянутые выше, у нас все еще остается весьма широкий выбор. Вообще говоря, наш выбор зависит от того, насколько «информативные» описания мы хотим получать. Чем информативней описание, тем меньше множеств удовлетворяет этому описанию. Затратив некоторые усилия, мы можем легко формализовать смысл слов «одно описание *более информативно*, чем другое». Мы будем говорить, что описание D_1 более информативно, чем другое описание D_2, если множество объектов, описываемых посредством D_1, принадлежит множеству объектов, описываемых посредством D_2. Если включение направлено в противоположную сторону, то D_2 — более информативное описание. Если ни то, ни другое включение не имеют места, то по содержанию информации эти два описания не сопоставимы. Очевидно, что, согласно этому определению, никакое описание множества не может быть более информативным, чем само множество. Выражаясь языком теории информации, более информативное описание в большей степени уменьшает наше первоначальное незнание объекта.

Хотя преимуществом более информативных описаний является их точность, они обладают также некоторыми существенными неудобствами. Может быть, наиболее значительное из них связано с тем, что часто удобно считать объекты некоторого семейства эквивалентными; например, мы можем пожелать, чтобы объекты, полученные в результате параллельного переноса данного объекта, считались неотличимыми от него самого. Если мы ограничимся только очень информативными описаниями, то описания для данного объекта и для объектов, полученных в результате его параллельных переносов, будут различными. Другие часто применяемые классы эквивалентности представляют собой множества, полученные вращением и растяжением данного объекта. В общем случае мы говорим об описаниях, которые *инвариантны* по отношению к некоторым группам преобразований. Цель всех усилий состоит в том, чтобы найти описания, которые были бы инвариантными по отношению к преобразованиям, вызывающим «несущественные» изменения объектов, и в то же время чувствительными к преобразованиям, изменяющим объекты «существенным» образом.

9.3.1. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Фундаментальный способ описания подмножества плоскости заключается в том, чтобы указать некоторые *топологические свойства* множества. Топологическим называется свойство, инвариантное по отношению к так называемым резинообразным искажениям. Представим себе, что плоскость изображения выполнена в виде резиновой пленки; тогда топологические свойства подмножеств этой пленки не должны изменяться при любых ее растяжениях. (Однако топологические свойства будут, вообще говоря, изменяться при разрывах пленки или при наложении ее частей друг на друга.)

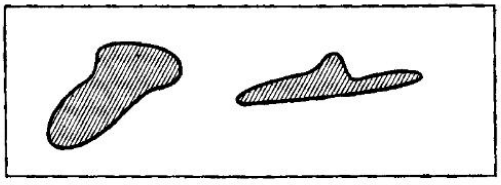


Рис. 9.9. Объект, состоящий из двух связных компонент.

Резинообразное искажение плоскости называется *топологическим отображением* плоскости на себя или *гомеоморфизмом*. Формально гомеоморфизм определяется как взаимно однозначное непрерывное отображение, причем обратное отображение также непрерывно. Заметим, что топологические свойства множеств не могут основываться на каком бы то ни было понятии расстояния, поскольку расстояния искажаются при топологическом отображении. Точно так же они не могут вовлекать какие-либо свойства, основанные в конечном счете на понятии расстояния, такие, как площадь множества, параллельность между двумя кривыми, перпендикулярность двух прямых и т. д. Очевидно, что топологические описания множеств будут в самом деле весьма общими, а потому и не очень информативными в обсуждавшемся выше смысле.

Одно из часто используемых топологических свойств множества — это число его *связных компонент*. Связная компонента множества — это такое его подмножество максимально возможного размера, что любые две его точки могут быть соединены связной кривой, целиком принадлежащей подмножеству. На рис. 9.9 показано множество из двух связных компонент. Ясно, что только что приведенное определение связной компоненты представляет собой просто формализацию интуитивного понятия связности. Читатель может вспомнить (из нашей дискуссии по поводу 4 и 8-связок на сетке из квадратных элементов), что даже это простое топологическое свойство может быть причиной неоднозначности, если плоскость изображения квантована. Как и раньше, когда мы имели дело с дискретными изображениями, квантованными с помощью сетки из квадрат-

ных элементов, мы будем использовать 4-связку для точек объекта и 8-связку для точек фона.

Другое представляющее интерес топологическое свойство — это число *дыр* в объекте. Строго говоря, число дыр в объекте на единицу меньше, чем число связных компонент в дополнении объекта [1]). На рис. 9.10 показан объект с двумя дырами. Пусть C — число

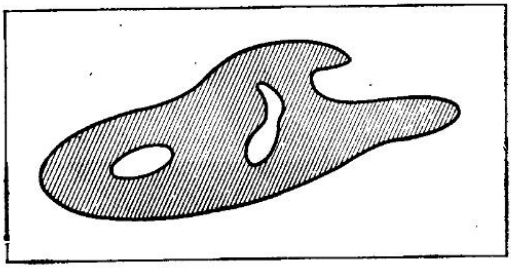


Рис. 9.10. Объект с двумя дырами.

связных компонент объекта, а H — число дыр; тогда *число Эйлера* E определяется как $E=C-H$. Очевидно, что число Эйлера также является топологическим свойством объекта.

Предположим на некоторое время, что мы ограничили наше внимание объектами, составленными только из прямых линий. Мы будем считать, что объект состоит только из самих прямых линий, поэтому, например, штриховой объект, показанный на рис. 9.11а, содержит две связные компоненты (четырехугольник и треугольник). Штриховые объекты такого вида иногда называют *многоугольными сетями*. Иногда из каких-то соображений удобно различать два вида внутренних областей в такой сети и называть одни из них *поверхностями*, а другие *дырами*. На рис. 9.11б показана многоугольная сеть из двух связных компонент с тремя поверхностями и тремя дырами. Для многоугольной сети число Эйлера может быть записано в особенно простой форме. Если мы обозначим буквой V число вершин, буквой S число ребер (или краев), а буквой F число поверхностей, то знаменитая *формула Эйлера*, связывающая эти величины, будет выглядеть так:

$$V-S+F=C-H=E.$$

Для рис. 9.11б, например, получим

$$15-19+3=2-3=-1.$$

Топологические описания объектов находят применение в анализе сцен в качестве показателей для предварительной сортировки, для контроля точности других описаний и как дополнение к другим

[1]) Имеется в виду фон, рассматриваемый как объект.— *Прим. перев.*

описаниям. Например, некоторые методы опознавания знаков используют число дыр в качестве одного из признаков в описании формы знака. В общем задачи, в которых достаточно одного топологического описания, встречаются редко.

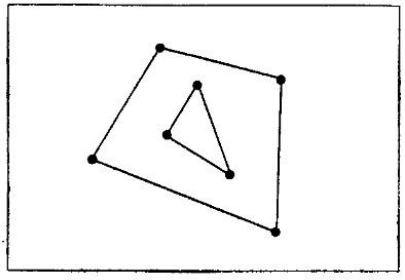


Рис. 9.11а. Многоугольная сеть.

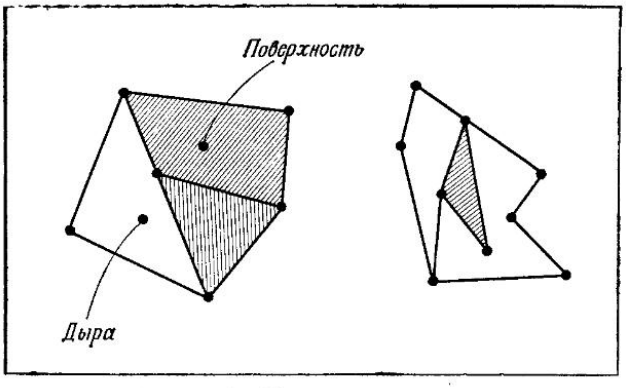


Рис. 9.11б. Многоугольная сеть.

9.3.2. ЛИНЕЙНЫЕ СВОЙСТВА

Для простоты на некоторое время ограничим наше внимание объектами, заданными на сетке квадратных элементов. Нас будут интересовать описания свойств таких объектов в зависимости от того, могут ли они вычисляться с помощью «простой» схемы. В частности, мы будем обсуждать свойства квантованных объектов, которые могут опознаваться с помощью линейной схемы, рассмотренной в ч. I.

Предположим тогда, что имеет место ситуация, показанная на рис. 9.12. Мы начнем с бинарного дискретного изображения, на котором элементы, равные «1», представляют точки объекта. Мы полагаем, что у нас есть семейство *функций-предикатов* f_i, которые воспринимают значения некоторых элементов изображения в качестве входных величин и дают на выходе либо нуль (ложь), либо

единицу (истина). Функции f_i можно считать признаками объекта — объект либо обладает i-м признаком, либо нет. Признаки поступают на вход линейной схемы, которая формирует линейные комбинации $T=\sum_{i=1}^{n} w_i f_i$ и сравнивает их с порогом t. В конечном итоге мы говорим, что объект обладает свойством P, если линейная комбинация превосходит порог t, и не обладает свойством P в протнвном случае. Вопрос заключается в следующем: какой класс свойств объекта может вычислять такое устройство?

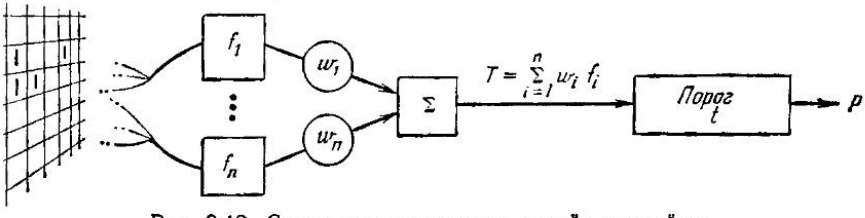


Рис. 9.12. Схема для вычисления линейных свойств.

Сразу же ясно, что на этот вопрос не может быть дано представляющего интерес ответа до тех пор, пока мы не наложили ограничения на функции-предикаты f_i. Если мы примем, что единственный предикат может вычислять любое желаемое свойство объекта (т. е. указывать, обладает объект этим свойством или нет), то используем этот единственный предикат и отбросим остальную часть схемы. В соответствии с этим мы наложим ограничения на способ, посредством которого функция-предикат получает информацию о точках изображения на сетчатке. Двумя видами ограничений, представляющих интерес, являются *ограничение по диаметру* и *ограничение по порядку*. Мы будем говорить, что предикат ограничен по диаметру величиной d, если множество элементов изображения, от которых он зависит, целиком лежит внутри круга диаметра d. Аналогично предикат ограничен по порядку величиной n, если он зависит не более чем от n элементов изображения [1]). Подобно этому, ограниченная по диаметру (или порядку) линейная схема — это такая схема, в которой все предикаты ограничены по диаметру (или порядку). Заметим, что мы не ограничиваем ни число предикатов, ни их логические формы — ограничиваем лишь выбор входных элементов для одного произвольного предиката. Будем называть *линейным свойством* объекта свойство, которое можно вычислить с помощью линейной схемы (с объявленными заранее ограничениями относительно предикатов).

---

[1]) Мы, конечно, подразумеваем, что эти ограничения не бессмысленны, т. е. считается, что диаметр сетчатки больше d и она содержит больше чем n элементов.

Пользуясь этими определениями, мы можем изложить несколько замечательных результатов, относящихся к линейным свойствам объектов. В некоторых случаях мы будем доказывать результат, в других будем просто формулировать его. Читателя, заинтересовавшегося дальнейшим изложением этих вопросов, мы отсылаем к превосходной книге основоположников этой теории Минского и Пейперта (1969). Начнем с некоторого свойства ограниченных по диаметру линейных схем, которое легко доказывается.

Результат 1: Ни одна ограниченная по диаметру линейная схема не способна определить, связный или нет некоторый произвольный объект.

Этот результат можно проверить с помощью примера. Задавшись максимальным диаметром d, мы можем нарисовать объекты, опровергающие гипотезу о существовании ограниченной по диаметру линейной схемы, способной отличать связные объекты от несвязных.

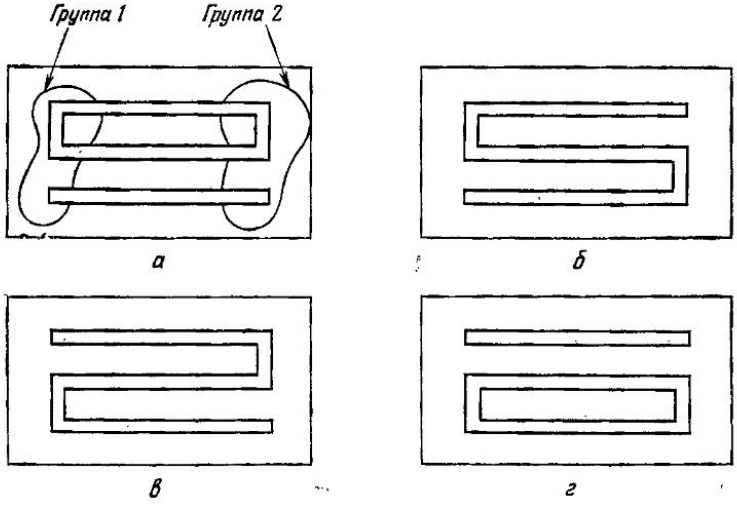


Рис. 9.13. Примеры к результату относительно связности.

Нужные нам объекты изображены на рис. 9.13, *а* — 9.13, *г*, где для наглядности сетка квантования не показана. Примем, что во всех случаях ограничение по диаметру d меньше, чем ширина объекта, и поэтому ни один из предикатов не может «видеть» оба конца. Для удобства мы сгруппировали предикаты, как показано на рис. 9.13, *а*. Предикаты группы 1 связаны с левым концом объекта, группы 2 — с правым, а предикаты группы 3 связаны с остальной частью сетчатки. Без какой-либо потери общности предположим, что линейная сумма T превосходит порог t для связных объектов. Поскольку

объект рис. 9.13, *а* несвязный, мы получим сумму, например T_a, меньшую порога t. Поскольку объект рис. 9.13, *б* связный, найдем, что $T_б > t$ и, кроме того, что этот прирост $T_б - T_a$ должен полностью определяться вкладом предикатов группы 2. Точно так же для объекта рис. 9.13, *в* мы получим, что $T_в > t$ и что прирост $T_в - T_a$ должен определяться только предикатами группы 1. Наконец, для объекта рис. 9.13, *г* должен возрасти вклад в сумму от обеих групп предикатов, поскольку каждая группа «видит» те же изменения, что она видела и раньше. Таким образом, сумма $T_г$ для последнего изображения будет даже больше, чем каждая из сумм $T_б$ и $T_в$, поэтому порог будет превышен и линейная схема ошибочно определит, что объект рис. 9.13, *г* связный.

Подобного рода утверждение для ограниченных по порядку линейных схем выступает как

Результат 2: Порядок линейной схемы, способной вычислять связность, неограниченно растет по мере того, как число элементов сетчатки стремится к бесконечности.

В частности, можно показать, что минимальный порядок линейной схемы, способной вычислять связность, пропорционален корню квадратному из числа элементов сетчатки. Оба первых результата вместе показывают, что связность — элементарное топологическое свойство — и в самом деле оказывается чересчур сложным для линейных схем.

Наш третий результат касается способности ограниченных по диаметру и порядку линейных схем вычислять предикаты, определяющие число Эйлера.

Результат 3: Свойство «число Эйлера для объекта больше чем k» может быть вычислено посредством линейной схемы порядка 4 и диаметра 2.

Корнем этого утверждения является тот факт, что число Эйлера для объекта может быть вычислено посредством линейной суммы, каждый член которой зависит только от нескольких элементов. А именно пусть U — число элементов объекта, P — число пар элементов, смежных по горизонтали или вертикали, и Q — число «квадратов» объекта размером 2×2 элемента. Нетрудно показать, что тогда число Эйлера определяется формулой

$$E = C - H = U - P + Q.$$

Эту формулу можно доказать с помощью индукции по U, т. е. по числу элементов. Она явно справедлива для объекта, содержащего один элемент. Доказательство состоит из анализа вариантов, в котором перебираются все возможные пути увеличения имеющегося

объекта на один элемент. В качестве примера такого анализа предположим, что мы увеличиваем объект, добавляя один элемент таким образом, чтобы он касался только одного из имевшихся ранее элементов объекта. (Напомним, что подразумевается «касание» по правилу 4-связки.) Такого рода добавление элемента не может изменить ни числа связных компонент, ни числа дыр, поэтому число Эйлера для данного объекта не изменяется. Как следствие, число элементов U увеличивается на единицу, число пар P увеличивается на единицу, а число квадратов Q не изменяется, поэтому величина $U-P+Q$ также остается неизменной и переход по индукции для этого случая подтверждается. Одна из причин интереса к результату 3 заключается в том, что он показывает, как можно определить число Эйлера другим способом, связав его с такими свойствами объекта, которые вычислимы посредством линейных схем.

Результат 4: Все возможные топологические свойства конечного порядка являются функциями числа Эйлера.

Под «конечным порядком» мы подразумеваем, что порядок не возрастает неограниченно при неограниченном возрастании числа элементов сетчатки. Интересно отметить, что, хотя линейная схема конечного порядка может вычислить для объекта число Эйлера, она не может определить, является ли он связным.

Мы приведем последний результат относительно линейных свойств, касающийся понятия *выпуклости*. Объект называется выпуклым, если любой прямолинейный сегмент, концевые точки которого принадлежат объекту, также принадлежит объекту. Из этого определения можно заключить, что объект выпуклый, если он содержит середину прямого отрезка во всех случаях, когда он содержит концы этого отрезка. Теперь мы можем догадаться, что в схеме для вычисления выпуклости необходимо рассматривать только тройки точек сетчатки, и это на самом деле верно. А именно мы получаем

Результат 5: Выпуклость может быть вычислена линейной схемой порядка 3.

Представленные нами результаты по линейным свойствам могут интерпретироваться с двух точек зрения. С практической точки зрения они представляют лишь ограниченный интерес, поскольку использование только линейных пороговых функций является слишком сильным ограничением ввиду той легкости, с которой могут применяться и более общие виды функций. С более общей точки зрения, однако, эти результаты проясняют связь между классическими схемами принятия решений в опознавании образов и простыми свойствами объектов.

9.3.3. МЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Остаток этой главы мы посвятим свойствам объектов, которые связаны в конечном счете с понятием *метрики*. Смысл этого термина заключается в обобщении понятия евклидова расстояния, и поэтому метрические свойства будут в общем изменяться, если плоскость изображения подвергать каким-либо деформациям. В таком случае, следовательно, мы можем ожидать, что метрические свойства будут чаще приводить к более информативным описаниям объекта, чем топологические, которые обсуждались ранее.

Мы начнем с повторения формального определения метрики, данного в гл. 6. Метрикой d называется вещественная функция двух точек плоскости изображения, которая для любых точек этой плоскости x, y и z обладает следующими свойствами:

i) $d(x, y) \geqslant 0$, причем $d(x, y)=0$ тогда и только тогда, когда $x=y$ (положительность);

ii) $d(x, y)=d(y, x)$ (симметрия);

iii) $d(x, y)+d(y, z) \geqslant d(x, z)$ (неравенство треугольника). Самой обычной метрикой является, конечно, евклидово расстояние. Пусть точками будут $x=(x_1, x_2)$ и $y=(y_1, y_2)$; нетрудно убедиться, что функция

$$d_E(x, y)=[(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2]^{1/2}$$

удовлетворяет условиям i — iii. Двумя другими метриками, полезными в анализе сцен, являются *метрика абсолютного значения*

$$d_A(x, y)=|x_1-y_1|+|x_2-y_2|$$

и *метрика максимального значения*

$$d_M(x, y)=\max\{|x_1-y_1|, |x_2-y_2|\}.$$

Читатели, знакомые с функциональным анализом, узнают в величине d_A метрику, основанную на норме L^1, а в величине d_M метрику, основанную на норме L^∞. Один из способов уяснить себе смысл этих определений заключается в том, чтобы построить для каждой метрики геометрическое место точек на плоскости изображения, удаленных на единичное расстояние от начала координат. Эти геометрические места вычерчены на рис. 9.14. Метрику d_A иногда называют «метрикой городских кварталов» (хотя геометрическое место имеет форму бриллианта) из-за того, что расстояния измеряются параллельно осям координат. Покажем в качестве упражнения, что функция d_A действительно удовлетворяет условиям i — iii. Сразу же видно, что функция d_A положительна и симметрична. Чтобы проверить неравенство треугольника, напишем

$$d_A(x, y)+d_A(y, z)=|x_1-y_1|+|x_2-y_2|+|y_1-z_1|+|y_2-z_2|.$$

Но

$$|x_1-y_1|+|y_1-z_1|\geqslant|x_1-z_1|$$

согласно неравенству треугольника для вещественных чисел, и то же самое имеет место для вторых компонент; поэтому

$$d_A(x, y)+d_A(y, z)\geqslant|x_1-z_1|+|x_2-z_2|=d_A(x, z),$$

и условие iii удовлетворяется. Прежде чем покончить с формальными определениями, мы хотели бы обратить внимание на несколько привлекательных с виду функций, которые *не являются* метриками. Функция d_E^2 не является метрикой, поскольку, как можно устано-

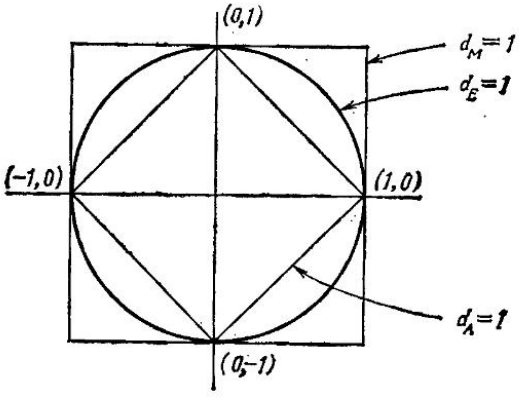


Рис. 9.14. Геометрические места точек, удаленных на единичное расстояние от начала координат, построенные для различных метрик.

вить, при $x=(1, 0)$, $y=(2, 0)$ и $z=(3, 0)$ неравенство треугольника нарушается. Когда мы имеем дело с квантованными изображениями, появляются некоторые дополнительные тонкости. Точки изображения будут иметь целые координаты, но если мы вычисляем, например, евклидово расстояние между парой точек изображения, результат в общем случае не будет целым. Если мы непременно хотим иметь целые расстояния, у нас может появиться соблазн округлять истинное евклидово расстояние. Для этой функции округленного евклидова расстояния неравенство треугольника, к сожалению, нарушается, что можно видеть, взяв $x=(0, 0)$, $y=(1, 1)$ и $z=(2, 2)$ и получив при этом $d(x, y)=1$, $d(y, z)=1$ и $d(x, z)=3$. В качестве альтернативы мы можем попытаться уменьшать евклидово расстояние до ближайшего целого вместо того, чтобы округлять его, но это также нарушит неравенство треугольника, в чем можно убедиться, взяв $x=(0, 0)$, $y=(1, 1)$ и $z=(3, 4)$. На практике эти трудности часто обходят, либо просто пренебрегая ими, либо используя более простую в вычислительном отношении метрику абсо-

лютного значения, которая всегда дает целые расстояния, если точки имеют целые координаты.

Выполнив эти предварительные формальности, перечислим теперь некоторые наиболее очевидные метрические свойства, которые могут использоваться при опознавании формы. К простейшим метрическим свойствам объекта относятся *площадь* и *периметр*. Их легко вычислить для дискретных объектов, и они часто используются либо как составные части более сложных описаний, либо как параметры начальной сортировки, позволяющие определить, который из нескольких объектов в сцене должен обрабатываться первым. Совместно их используют, чтобы вычислить *отношение толщины* T, которое для объекта с площадью A и периметром P определяется формулой

$$T = 4\pi\left(\frac{A}{P^2}\right).$$

Знаменитая теорема, известная еще в древности, гласит, что максимальное значение T равно единице и достигается в том случае, если объект, форма которого исследуется, представляет собой круг. Аналогично из всех треугольников равносторонний треугольник имеет максимальное значение T (для него $T=\pi\sqrt{3}/9$), а из всех четырехугольников максимальное значение T имеет квадрат (для него $T=\pi/4$). В более общем случае отношение толщины правильного n-угольника равно

$$\frac{\pi}{n}\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi}{n}\right),$$

и эта величина монотонно стремится к единице при возрастании числа сторон. Грубо говоря, чем толще объект, тем больше связанное с ним отношение толщины; напротив, объекты, похожие на линию, будут иметь отношение толщины, близкое к нулю. Более того, отношение толщины безразмерно и, следовательно, зависит только от формы (но не от масштаба) объекта.

Второе свойство, которое можно использовать для измерения удлиненности объектов, называется *отношением аспекта*. Отношение аспекта прямоугольника есть отношение его длины к ширине, поэтому отношение аспекта, близкое к единице, соответствует «толстому» прямоугольнику. Для того чтобы распространить это понятие на произвольные объекты, заключим объект в некоторый прямоугольник и отношением аспекта для него будем называть отношение аспекта описанного прямоугольника. Возможны несколько различных определений, соответствующих различным способам построения прямоугольника вокруг объекта. Простейшее определение предполагает, что стороны прямоугольника параллельны координатным осям плоскости изображения. Однако, как показано на рис. 9.15, расположение координатной системы иногда может случайно привести к ситуации, при которой очень тонкий объект имеет отношение

аспекта, близкое к единице. Более сложное определение предполагает, что стороны прямоугольника параллельны собственным векторам матрицы рассеяния [1]) точек объекта. Как мы видели в случае подбора линий, линия, параллельная главному собственному вектору, сама по себе является хорошей аппроксимацией точек объекта, если объект похож на линию. Для произвольного объекта собственные векторы физически соответствуют направлениям, относительно которых объект имеет максимальный и минимальный моменты инерции; таким образом, они хорошо согласуются с нашим интуитивным представлением о направлениях, по которым объект толстый и тонкий. Более того, сами собственные значения представляют собой два момента инерции относительно этих осей; поэтому, согласно третьему альтернативному определению, отношение аспекта есть отношение собственных значений матрицы рассеяния. На практике вычисления, которые требуются в связи с этим усовершенствованным определением, должны компенсироваться количеством получаемой информации.

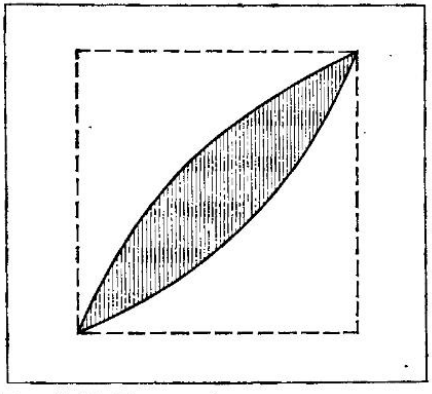


Рис. 9.15. Тонкая фигура с отношением аспекта, равным единице.

9.3.4. ОПИСАНИЯ, ОСНОВАННЫЕ НА НЕРЕГУЛЯРНОСТЯХ

Мы продолжим наше обсуждение метрических свойств, изложив два метода описания, рассчитанные на то, чтобы отображать существенные «нерегулярности» объекта. Первый метод использует отклонения от выпуклости, второй построен на локальных экстремумах периметра.

9.3.4.1. Выпуклая оболочка и дефицит выпуклости

Выше мы определили выпуклое множество как множество, содержащее каждый отрезок прямой, соединяющий две его точки. *Выпуклая оболочка* H произвольного множества S есть наименьшее выпуклое множество, содержащее S. Если множество S выпуклое с самого начала, то, конечно, $H=S$. Если множество S содержит только одну связную компоненту, то H можно представить себе

[1]) Напомним, что матрица рассеяния n точек пропорциональна ковариационной матрице реализации для этих точек.

как множество, ограниченное резиновой лентой, натянутой по периметру множества S. Разность множеств $H—S$ называется *дефицитом выпуклости* D множества S. На рис. 9.16 дефицит выпуклости множества S показан в виде заштрихованной области. Очевидно, что любое множество полностью определяется его выпуклой оболочкой и дефицитом выпуклости. Причина, по которой мы рассматриваем эти множества в описаниях объектов, заключается в том, что они часто позволяют разделить естественным образом сложный объект на несколько менее сложных частей. Например, если читатель поставит задачу описать на английском языке множество S на рис. 9.16, он может с успехом ее решить, описав сначала выпуклую оболочку, а потом обе части дефицита выпуклости. Естественным образом можно получить дальнейшее разделение объекта, заметив, что компоненты всякого дефицита выпуклости распадаются на два различных вида: компоненты, лежащие на границе выпуклой оболочки, и компоненты, заключенные в множество S. За неимением лучшего термина эти два вида компонент иногда называют заливами и озерами. На рис. 9.16 часть D_1 есть залив, а часть D_2 — озеро. Заливы и озера объекта могут быть описаны их номером, приблизительным положением относительно объекта и в общем любыми средствами, имеющимися для описания объектов. Таким образом, описание объекта может состоять из описания его выпуклой оболочки, которая обычно проще, чем сам объект, а также его озер и заливов.

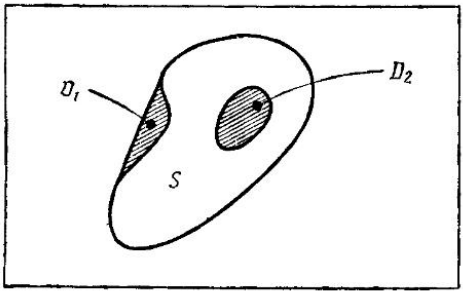


Рис. 9.16. Дефицит выпуклости объекта.

Мы должны здесь упомянуть, что расширение понятия выпуклости на дискретные объекты требует некоторой осторожности. Трудности связаны с тем обстоятельством, что, если дан выпуклый аналоговый объект, его квантованный образ в общем случае не выпуклый. Квантованный круг, например, имеет ступенчатую границу и, таким образом, не попадает в число выпуклых. Простой и понятный способ решения этой задачи заключается в следующем: натянуть резиновую ленту вокруг квантованного объекта и считать, что дефицит выпуклости включает только те элементы фона, которые полностью лежат внутри резиновой ленты. Если дефицит выпуклости пуст, тогда, конечно, объект (квантованный) считается выпуклым. Грубо говоря, эти определения сводятся к заданию некоторого допуска, который следует учитывать до того, как относить дискретный объект к числу невыпуклых.

9.3.4.2. Локальные экстремумы границы объекта

В предыдущем пункте мы обсуждали способ описания кривой через ее точки высокой кривизны. Довод здесь заключался в том, что информативными следует считать такие точки, в которых имеют место какие-либо резкие изменения. Подобным же образом мы можем описать границу объекта с помощью точек, в которых она достигает локального экстремума по оси X или Y. На рис. 9.17, например, точки 1, 2, 3 и 5 представляют собой попеременно локальные минимумы и максимумы в направлении оси X, а точки 4 и 6 — максимум и минимум (единственные) в направлении оси Y. Как видно из рисунка, эти точки находятся вблизи точек границы с высокой кривизной, что бывает часто, хотя и не всегда.

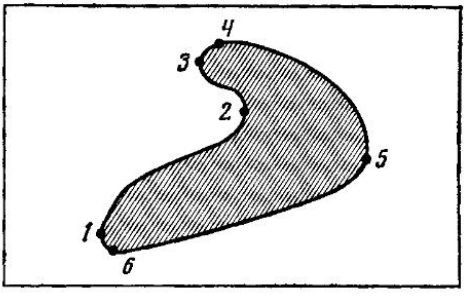


Рис. 9.17. Локальные экстремумы объекта.

Если должно использоваться описание объекта через экстремальные точки, необходимо, очевидно, сгладить малые флуктуации границы объекта. Один из способов выполнить эту операцию заключается в регуляризации объекта посредством скользящего среднего, но при этом неизбежно возникает существенная потеря разрешающей способности. Более мощный метод называется *гистерезисным сглаживанием*. Гистерезисное сглаживание на самом деле представляет собой нелинейную процедуру для отыскания «существенных» экстремумов вещественной функции; для целей описания объекта она просто применяется отдельно к координатам X и Y точек границы. Имея это в виду, проиллюстрируем ее действие на примере функции одной переменной.

Предположим, как показано на рис. 9.18, нам дана функция $g(x)$, существенный экстремум которой мы ищем. Вообразим, что вертикальный проволочный прямоугольник перемещается вдоль кривой посредством указателя, который точно отслеживает функцию g. Считается, что проволочный прямоугольник обладает следующим свойством: не перемещается вверх до тех пор, пока его не потянет вверх указатель, и, наоборот, не перемещается вниз до тех пор, пока его не потянут вниз. Другими словами, прямоугольник просто тянут в сторону вдоль кривой, не изменяя его вертикального положения. В точке A объекта указатель при его движении вдоль кривой тянет прямоугольник вверх. В точке B указатель только что прошел малый локальный максимум, а прямоугольник просто перемещается в сторону на одной и той же высоте, поскольку его не тя-

нут ни вверх, ни вниз. В точке C был достигнут другой локальный максимум (то, что здесь имеет место также и глобальный максимум, сейчас несущественно). В точке D прямоугольник перемещался в сторону, не двигаясь ни вверх, ни вниз, а в точке E указатель начал тянуть прямоугольник вниз. Функция $\bar{g}(x)$, вычерченная центром проволочного прямоугольника при его движении за указателем, представляет собой гистерезисно сглаженный вариант функции $g(x)$. Высота прямоугольника h называется *зазором гистерезиса*

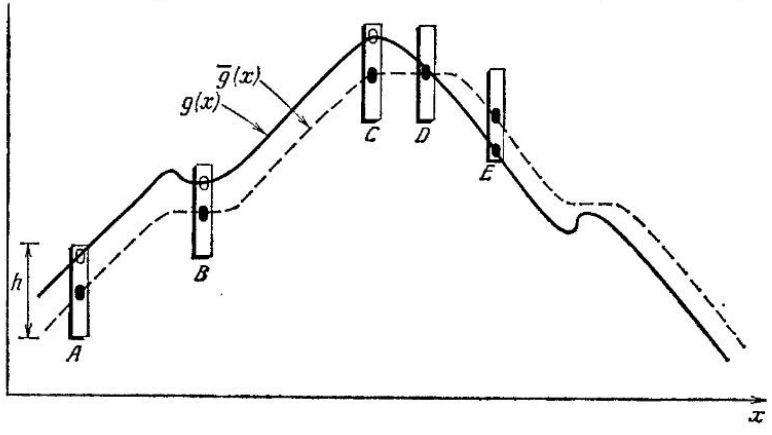


Рис. 9.18. Механизм гистерезисного сглаживания.

и играет роль независимого параметра, аналогичного ширине окна в процедуре получения скользящего среднего. Локальный экстремум сглаженной функции определяет существенный локальный экстремум исходной функции. В типичном случае, как показано на рис. 9.18, сглаженная функция достигает локального экстремума не в единственной точке [1]). Когда это имеет место, разумно в качестве экстремальной выбрать точку с наименьшей координатой X — в данном случае точку C. (Заметим, что область функции $\bar{g}(x)$ вблизи точки B является «областью перегиба», а не экстремума.)

Было бы поучительным сравнить общие характеристики гистерезисного сглаживания с регуляризацией, поскольку это два основных метода, конкурирующих в решении текущей задачи отыскания экстремума функций. Основная трудность при использовании регуляризации как метода отыскания экстремума заключается в том, что, если мы хотим сглаживать малые флуктуации полностью, то должны применять относительно широкое усредняющее окно; такое окно, видимо, может также смазать и существенный экстремум.

[1]) Точка экстремума функции $\bar{g}$ единственная, если выброс функции g достаточно велик.

Пример такого случая показан на рис. 9.19, где мы изобразили функцию $g(x)$, имеющую два заметных пика и несколько малых шумовых выбросов. Мы регуляризировали $g(x)$, чтобы получить функцию $g_w(x)$, применяя в процессе усреднения окно ширины, достаточной, чтобы полностью подавить шумовые выбросы. К сожалению, нам удалось при этом ликвидировать также всякий намек на то, что функция $g(x)$ имеет два заметных пика. Конечно, можно использовать более узкое усредняющее окно. Тогда функция $g_w(x)$ сохранит

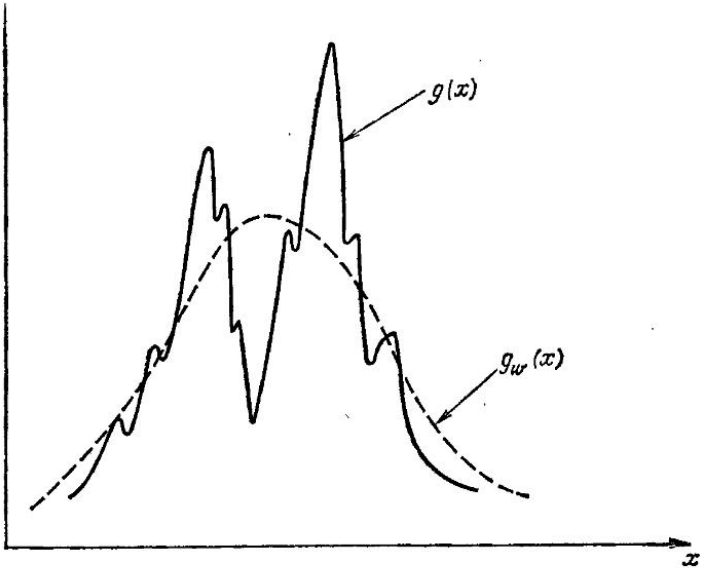


Рис. 9.19. Регуляризация функций.

какие-то признаки двугорбости, но она будет содержать также некоторый шум. Мы были бы поэтому вынуждены искать некоторое правило, позволяющее решать, какие из ее локальных экстремумов существенны. Скорее всего, мы выбрали бы правило, очень похожее на гистерезисное сглаживание; следовательно, можно с таким же успехом решить использовать только гистерезисное сглаживание и исключить предварительное усреднение.

Возвращаясь к первоначальной теме — описанию объекта через экстремумы его границы,— мы приведем несколько примеров, чтобы дать читателю возможность почувствовать «вкус» этого метода. Читатель может сам убедиться, что знак плюс и круг имеют идентичные описания в терминах экстремумов, хотя их дефициты выпуклости совершенно различны. С другой стороны, знак плюс в обычной ориентации и знак плюс, повернутый на 45°, имеют совершенно различные описания экстремумов. Если знак плюс повернут на 45°,

описание через экстремумы близко совпадает с описанием через точки высокой кривизны. Это не так в случае, когда знак плюс имеет свою обычную ориентацию. Ясно, что в общем случае на описание через экстремумы влияет ориентация объекта относительно координатных осей.

9.3.5. СКЕЛЕТ ОБЪЕКТА

Наиболее интригующий способ описания объекта основан на применении преобразования *к средним осям*, или так называемого метода *степного пожара*. Цель такого преобразования заключается в том, чтобы выделить из исходного объекта его штриховое представление, метко названное *скелетом*. Более того, преобразование выделяет также дополнительную информацию, которая вместе со скелетом позволяет восстановить исходный объект. Для простоты мы ограничим обсуждение преобразования к средним осям объектами, заданными в аналоговой форме и состоящими из одной компоненты.

Существует много эквивалентных определений скелета объекта. По-видимому, наиболее близко к интуитивным представлениям следующее определение. Представим себе, что внутренняя часть объекта покрыта сухой травой, а его окрестность (т. е. фон) — негорючей сырой травой. Предположим, что огонь возник одновременно во всех точках на границе объекта. Огонь будет распространяться с неизменной скоростью по направлению к центру объекта. Однако в некоторых точках линия продвижения огня от одной области границы будет пересекать фронт огня от какой-либо другой области, и эти два фронта будут гасить друг друга. Эти точки называются точками *гашения* огня; множество точек гашения определяет скелет объекта. Рассмотрим два очень простых примера. Если объект имеет форму круга, линия продвижения огня будет описываться концентрическими окружностями с непрерывно уменьшающимся радиусом до тех пор, пока огонь не погаснет в центре круга. В этом простейшем из всех возможных случаев скелет состоит из единственной точки — из центра круга. В качестве второго примера рассмотрим прямоугольник на рис. 9.20. Линия продвижения огня сначала также имеет прямоугольную форму, и прилегающие стороны гасят друг друга, образуя ребра скелета a, b, c и d. В некоторый момент эти ребра заканчиваются, короткие стороны огненного прямоугольника становятся равными нулю, а две оставшиеся длинные стороны гасят друг друга, образуя ребро e скелета.

Часто бывает удобным определить понятие скелета в терминах расстояний, не пользуясь представлением о взаимно подавляющих фронтах огня. Чтобы выполнить это, мы должны уточнить понятие расстояния от данной точки до множества точек. В соответствии с этим мы определим расстояние от точки x до множества A как рас-

стояние от x до ближайшей точки множества A. Формально величина $d(\mathbf{x}, A)$ для данной метрики d определяется выражением

$$d(\mathbf{x}, A) = \inf \{d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in A\},$$

где символ inf обозначает нижнюю грань. Если нам задан произвольный объект с границей B, мы можем для каждой точки объекта подсчитать ее расстояние до множества B. При этом, однако, мы заметим, что для некоторых точек это расстояние вычисляется не единственным образом. Для каждой такой точки x мы найдем по крайней мере две граничные точки, например y и z, такие, что $d(\mathbf{x}, B) = d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{x}, \mathbf{z})$. Эти «особенные» точки определяют скелет.

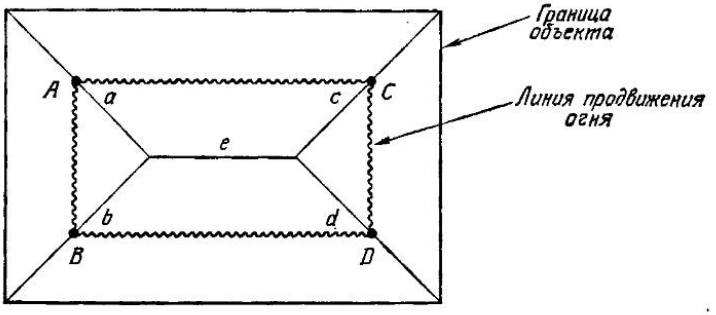


Рис. 9.20. Скелет прямоугольника.

Интуитивно ясно, что это определение скелета эквивалентно предыдущему. Поскольку огонь распространяется с постоянной скоростью, точки гашения должны быть эквидистантны по крайней мере двум отдельным точкам границы, которые в свою очередь должны быть ближе к точке гашения, чем все другие граничные точки. Ясно, что для круглого объекта только центр удовлетворяет этому условию. На рис. 9.20 ребра a, b, c и d эквидистантны одной длинной и одной короткой стороне прямоугольника, а ребро e эквидистантно двум длинным сторонам. Это определение делает очевидной зависимость скелета от выбора метрики d. Здесь мы молчаливо приняли евклидову метрику и будем продолжать ее использовать.

Метрическая интерпретация понятия скелета дает естественное средство для построения более полного описания объекта. Свяжем с каждой точкой x скелета объекта, имеющего границу B, величину $q(\mathbf{x})$, определяемую равенством

$$q(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}, B).$$

Функция $q(\mathbf{x})$ называется *функцией гашения* скелета. Очевидно, что она представляет собой просто расстояние от данной точки скелета до границы объекта. (Мы можем также заметить, что величина

$q(\mathbf{x})$ пропорциональна времени, в течение которого огонь достигает точки $\mathbf{x}$.) Для каждого объекта, имеющего скелет S и функцию гашения q, мы назовем пару (S, q) *скелетной парой* объекта. Наибольший интерес представляет тот факт, что исходный объект может быть восстановлен по его скелетной паре. Восстановление выполняется просто: каждую точку $\mathbf{x}$ скелета мы делаем центром диска с радиусом $q(\mathbf{x})$. Объединение всех таких дисков точно соответствует исходному объекту. Таким образом, скелетная пара в некотором смысле представляет собой естественное расширение описания круга на произвольные множества.

Рассмотрим несколько подробнее утверждение, что скелетная пара содержит всю информацию, необходимую для восстановления исходного объекта. Чтобы установить истинность этого утверждения, мы должны показать, что множество F точек объекта идентично объединению U дисков. Мы покажем это неформально, обычным способом — продемонстрировав, что каждое из множеств содержится в другом. Сначала предположим, что точка $\mathbf{y}$ принадлежит множеству U. Тогда $\mathbf{y}$ принадлежит по крайней мере одному из дисков. Но по определению каждый диск содержится в множестве F, так как радиус $q(\mathbf{x})$ любого диска представляет собой расстояние от центра диска $\mathbf{x}$ до границы F. Следовательно, $\mathbf{y}$ принадлежит F. С другой стороны, предположим, что нам дана точка $\mathbf{y}$, принадлежащая F. Чтобы показать, что $\mathbf{y}$ принадлежит также U, достаточно найти один диск, содержащий $\mathbf{y}$. Мы можем найти такой диск следующим образом. Сначала проведем линию от $\mathbf{y}$ до ближайшей точки границы. Эта линия устанавливает последовательные положения фронта огня по мере его приближения к точке $\mathbf{y}$. Продолжим эту линию за точку $\mathbf{y}$, пока она не достигнет точки гашения $\mathbf{x}$, лежащей на скелете. Диск с центром в точке $\mathbf{x}$ содержит точку $\mathbf{y}$; следовательно, $\mathbf{y}$ принадлежит U.

Мы видели сейчас, что функцию гашения можно использовать для дополнения скелета S с тем, чтобы получить полное описание объекта. Ее можно также применять для получения менее информативного и поэтому более простого описания. Основная идея заключается в том, чтобы исключить части скелета, вдоль которых огонь распространяется медленно. Проверим эту идею с помощью рис. 9.20. Предположим сначала, что огонь распространяется по нормали к своему фронту с единичной скоростью. Тогда каждое из ребер a, b, c и d делит пополам соответствующий ему прямой угол, что можно видеть непосредственно из обоих определений скелета. Нетрудно установить, наконец, что каждая из точек A, B, C и D движется вдоль соответствующего ребра со скоростью $\sqrt{2}$. С другой стороны, вдоль ребра e огонь распространяется с бесконечной скоростью, так как это ребро формируется полностью в один момент времени. Мы можем тогда принять решение исключить из скелета все ребра, для которых скорость распространения меньше чем 1,5.

Эта операция сведет скелет к единственному ребру e. Если мы восстановим объект, используя только это ребро вместе со связанной с ним величиной $q(\mathbf{x})$, тогда получим то, что показано на рис. 9.21.

В простом примере рис. 9.20 скорость распространения вдоль любого ребра постоянна. В общем случае скорость распространения в произвольной точке $\mathbf{x}$ скелета равна $(dq/ds)^{-1}$, где s — расстояние до точки $\mathbf{x}$ вдоль скелета. В этом проще всего убедиться, рассматривая величину $q(\mathbf{x})$ не как расстояние от точки $\mathbf{x}$ до границы, а как время, в течение которого огонь достигает точки гашения $\mathbf{x}$. (Поскольку скорость огня постоянна в направлении нормали к его фронту, оба значения отличаются только постоянным множителем.) Таким образом, величина $(dq/ds)^{-1}$ представляет собой расстояние ds вдоль скелета, поделенное на время dq, требуемое для прохождения фронтом огня этого расстояния. Читатель, знакомый с распространением плоских волн, узнáет в этой величине просто фазовую скорость плоской волны вдоль касательной к скелету в точке $\mathbf{x}$.

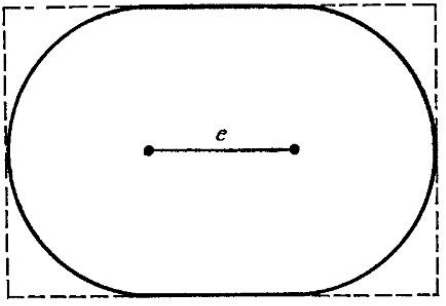


Рис. 9.21. Восстановление объекта по скелету, состоящему из одного ребра.

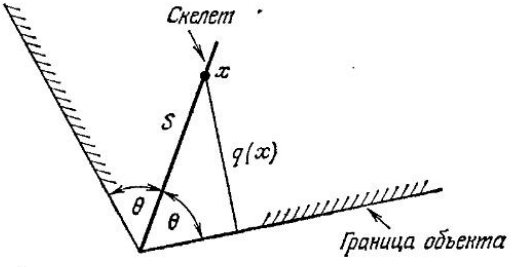


Рис. 9.22. Скелет вблизи угла границы.

Попробуем вникнуть немного глубже в смысл понятия скорости распространения вдоль ребра. Предположим, у нас есть часть границы объекта, как это показано на рис. 9.22, где две прямые линии пересекаются под углом 2θ. Скелет в этой области объекта делит угол пополам. Поскольку $q(\mathbf{x})=s(\sin\theta)$, мы сразу же получим, что $(dq/ds)^{-1}=1/\sin\theta$. Таким образом, чем больше угол между двумя сторонами границы, тем меньше скорость распространения вдоль этой части скелета. Две крайние скорости равны единице и бесконечности, и достигаются они соответственно, когда угол либо вырожда-

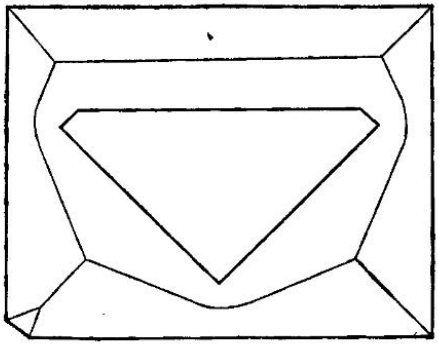


Рис. 9.23. Пример скелета.

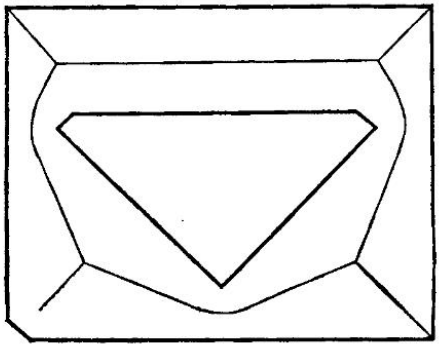


Рис. 9.24. Скелет, обработанный с порогом 1,25.

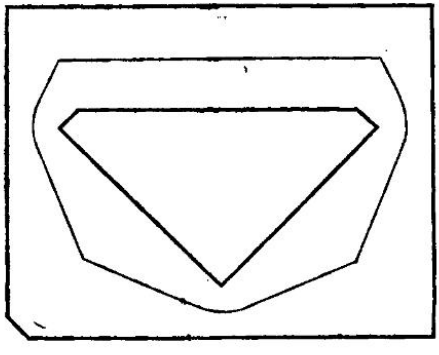


Рис. 9.25. Скелет, обработанный с порогом 1,5.

ется в прямую линию, либо, постепенно уменьшаясь, превращается в две параллельные линии (как для ребра e на рис. 9.20). Таким образом, игнорирование ребер скелета с низкой скоростью распространения сводится, грубо говоря, к игнорированию слабых изгибов «почти прямых» линий.

Более сложный пример показан на рис. 9.23—9.25[1]), где изображен многоугольный объект с одной дырой. Рис. 9.23 показывает его полный скелет. Существует интересная теорема, утверждающая, что скелет любого многоугольника составлен из частей, которые суть либо прямые линии, либо дуги парабол. Фундаментальная причина заключается в том, что геометрическое место точек, равноудаленных от двух прямых линий, есть прямая (биссектриса угла), а геометрическое место точек, равноудаленных от точки и прямой, есть парабола. На рис. 9.24 показан скелет, на котором стерты все части, имеющие скорость распространения меньше чем 1,25. Единственное изменение наблюдается внизу слева, где стерты ветви, связанные с тупыми углами границы. Если бы объект был восстановлен по этому скелету, его нижний левый угол представлял бы собой четверть круга. На рис. 9.25 порог был повышен до 1,5. Здесь один только скелет (т. е. взятый без функции гашения) весьма близко соответствует тому, что можно считать аппроксимацией объекта «внутренними» линиями.

Наше обсуждение до сих пор касалось только объектов, заданных в аналоговой форме. В дискретном случае ситуация в основном та же самая, за исключением того, что здесь трудней использовать евклидову метрику. Обычно используются приближения к евклидовой метрике, основанные на разного рода изощренных приемах. Кроме того, различные (но эквивалентные) определения скелета могут приводить к более эффективным последовательным реализациям этого существенно параллельного преобразования. Обсуждение этих вопросов увело бы нас несколько в сторону от наших основных интересов, связанных с описанием формы, и мы отсылаем читателя к литературе, приведенной в конце главы.

9.3.6. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ ФОРМЫ

До сих пор мы рассмотрели несколько способов, с помощью которых произвольный объект может быть, по крайней мере в принципе, представлен точно. Наиболее прямое из таких представлений просто указывает для каждой точки на плоскости изображения принадлежит ли эта точка объекту. Такое представление называется *характеристической* функцией объекта; характеристическая функция равна нулю в точках вне объекта и единице в точках внутри него. Очевидно, что характеристическая функция представляет собой обычную

[1]) Воспроизводится с разрешения Уго Монтанари.

функцию интенсивности $g(x, y)$, принимающую значения только нуль или единица. Другой вариант точного представления объекта может быть основан на его естественном уравнении $k=k(s)$, которое задает кривизну границы k как функцию длины дуги s, измеряемой от некоторой произвольной граничной точки. Эти полные описания объекта противоречат нашему замечанию о том, что описание должно быть проще, чем сам описываемый объект. Однако можно использовать различные математические методы, чтобы как-то аппроксимировать эти полные описания и таким путем получить более простые их формы. Обычный подход заключается в разложении точного представления в ряд и в последующем использовании только нескольких первых членов ряда. Коэффициенты при этих членах и составляют описание объекта.

Укажем сразу же один возможный вариант описания, который *не* работает. Мы можем по наивности разложить характеристическую функцию объекта $g(x, y)$ в ряд Тейлора в некоторой точке (x_0, y_0). К сожалению, ряд не сходится к функции $g(x, y)$. В самом деле, для всех точек (x, y) величина разложения должна быть либо нуль, либо единица в зависимости от того, находится точка (x_0, y_0) внутри объекта или снаружи. Вся беда в том, что характеристическая функция существенно разрывна на границе объекта. В следующих разделах мы будем обсуждать два метода, позволяющие обойти эту трудность. Первый основан на разложении в ряд естественной функции [1]) объекта; второй тесно связан с ее спектром Фурье.

9.3.6.1. Разложение естественной функции

Оперируя с естественной функцией объекта, мы неявно принимаем, что объект не имеет дыр и состоит только из одной связной компоненты. Если объект содержит более чем одну компоненту, мы используем столько естественных функций, сколько имеется компонент. Все дыры объекта игнорируются (хотя мы можем использовать естественную функцию границы дыры). В данный момент важным для наших целей свойством естественной функции $k(s)$ любого объекта является ее периодичность. Начиная с произвольной граничной точки, функция $k(s)$ определяет кривизну границы в зависимости от длины дуги [2]). Если длина границы объекта равна L, легко видеть, что равенство $k(s)=k(s+L)$ всегда имеет место независимо от выбора начальной точки. Следовательно, удобной формой представления естественной функции является ряд Фурье. А имен-

---

[1]) Этот термин также обозначает зависимость кривизны от длины дуги.— *Прим. перев.*

[2]) Напомним, что кривизна есть скорость изменения угла по длине дуги.

но мы можем записать функцию $k(s)$ в виде

$$k(s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left\{n \frac{2\pi i}{L} s\right\},$$

где коэффициенты c_n определяются формулой

$$c_n = \frac{1}{L} \int_0^L k(s) \exp\left\{-n \frac{2\pi i}{L} s\right\} ds.$$

Для произвольного заданного объекта можно вычислить несколько первых коэффициентов разложения. Эти коэффициенты и составят описание объекта. Если граница не содержит резких разрывов кривизны, то даже несколько членов ряда Фурье обеспечивают хорошую аппроксимацию, и, следовательно, эти коэффициенты оказываются весьма информативными.

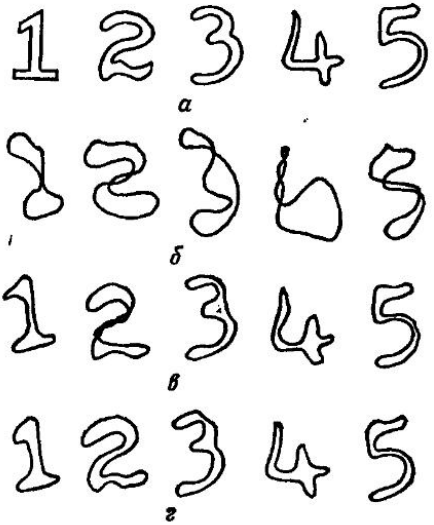


Рис. 9.26. Аппроксимация с помощью ряда Фурье. а) — исходные объекты, б) — пять гармоник, в) — десять гармоник, г) — пятнадцать гармоник (из книги Брилла, 1969; воспроизводится с разрешения автора).

Отвлечемся на короткое время и рассмотрим потенциальные трудности, связанные с применением естественной функции. Если в некоторой точке граница мгновенно изменяет направление, то кривизна в этой точке не определена. Для прямоугольника, например, естественная функция тождественно равна нулю всюду, кроме четырех точек; в этих точках функция принимает бесконечное значение. Чтобы избавиться от этого, мы определим новую «естественную функцию» как интеграл от старой; это значит, что мы описываем объект функцией, которая задает тангенс угла наклона границы в зависимости от длины дуги. Формальным определением новой функции $\theta(s)$ служит выражение

$$\theta(s) = \int_0^s k(\zeta)\, d\zeta.$$

При этом, однако, возникает новая трудность: функция $\theta(s)$ непериодическая, поскольку $\theta(s+L) = \theta(s) + 2\pi$. Нетрудно, однако, пока-

зать, что функция $\theta(s)-2\pi s/L$ периодическая с периодом L, и поэтому ее можно разложить в ряд Фурье. Мы можем записать еще одну модификацию нашей функции. Заметим, что среднее значение величины $\theta(s)-2\pi s/L$ зависит от выбора начальной точки границы. Следовательно, естественно ликвидировать эту зависимость вычитанием среднего. В соответствии с этим мы определим *угловую естественную функцию* $\hat{\theta}(s)$ выражением

$$\hat{\theta}(s)=\theta(s)-\frac{2\pi s}{L}-\mu,$$

где

$$\mu=\frac{1}{L}\int_0^L\left[\theta(s)-\frac{2\pi s}{L}\right]ds.$$

Эффект от аппроксимации угловой естественной функции усеченным рядом Фурье иллюстрируется рис. 9.26, *а*—9.26, *г* [1]). На рис. 9.26, *а* показан набор из пяти цифр. На рис. 9.26, *б* — 9.26, *г* показаны границы, полученные после аппроксимации угловой естественной функции посредством соответственно 5, 10 и 15 членов ряда Фурье. Ясно, что для описания границ с приемлемой точностью достаточно даже небольшого числа членов ряда.

9.3.6.2. Аппроксимация посредством моментов

Пусть дана произвольная функция интенсивности $g(x, y)$; тогда *момент* m_{pq} порядка (p, q) функции g определяется формулой

$$m_{pq}=\int_{-\infty}^{\infty}\int x^p y^q g(x, y)\,dx\,dy,\ p, q=0, 1, 2, \ldots .$$

(Поскольку мы определили моменты для произвольных функций интенсивности, то все последующее тем более справедливо для характеристической функции объекта.) Если функция интенсивности g является достаточно «хорошей» с математической точки зрения, что справедливо для всех физически реализуемых функций интенсивности, то множество моментов m_{pq} обладает свойством фундаментальной важности: моменты определяют единственным образом функцию интенсивности g и единственным образом определяются ею. Таким образом, двойной ряд моментов дает полное описание объекта, а частичное описание объекта можно получить, используя некоторое подмножество моментов.

Читатель может теперь заподозрить, что множество моментов состоит из коэффициентов разложения в ряд некоторого полного описа-

[1]) Из работы Брилла «Character Recognition Via Fourier Descriptors», Wescon, Paper 25/3 (1968).

ния объекта. Это и в самом деле так. Определим *порождающую моменты функцию* $M(u, v)$ для некоторой функции интенсивности $g(x, y)$ с помощью формулы

$$M(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty}\int \exp\{ux + vy\}\, g(x, y)\, dx\, dy.$$

Заметим, что это определение напоминает определение спектра Фурье функции g. Наше допущение, что функция g «хорошая», позволяет разложить порождающую моменты функцию в степенной ряд следующим образом:

$$M(u, v) = \sum_{p=0}^{\infty}\sum_{q=0}^{\infty} a_{pq}\frac{u^p}{p!}\frac{v^q}{q!}.$$

Мы утверждаем, что коэффициенты a_{pq} представляют собой в точности моменты функции g. Чтобы убедиться в этом, оценим частную производную разложения в ряд порядка (p, q) в точке $(0, 0)$ и получим

$$\frac{\partial^{p+q} M(0, 0)}{\partial u^p\, \partial v^q} = a_{pq}.$$

С другой стороны, из определения порождающей моменты функции частная производная функции M порядка (p, q) равна

$$\frac{\partial^{p+q} M(u, v)}{\partial u^p\, \partial v^q} = \int_{-\infty}^{\infty}\int x^p y^q \exp\{ux + vy\}\, g(x, y)\, dx\, dy,$$

и поэтому

$$a_{pq} = \frac{\partial^{p+q} M(0, 0)}{\partial u^p\, \partial v^q} = \int_{-\infty}^{\infty}\int x^p y^q g(x, y)\, dx\, dy = m_{pq}.$$

Порождающая моменты функция играет заметную роль в статистике, где функция $g(x, y)$ интерпретируется как функция плотности распределения. Заметим, что в нашем случае момент нулевого порядка m_{00} представляет собой просто объем, заключенный под поверхностью $g(x, y)$. Поскольку мы интерпретируем g как характеристическую функцию объекта, величина m_{00} представляет собой его площадь. В статистике два момента первого порядка m_{10} и m_{01} являются средними значениями функции плотности вероятности по осям X и Y. Приблизительно то же справедливо и для нашего случая. Деление величин m_{10} и m_{01} на m_{00} нормирует их по отношению к площади объекта и дает координаты $\bar{X}$ и $\bar{Y}$ его центра тяжести.

Родственное множество моментов составляют *центральные моменты* функции $g(x, y)$, определяемые формулой

$$\mu_{pq} = \int_{-\infty}^{\infty}\int \left(x - \frac{m_{10}}{m_{00}}\right)^p \left(y - \frac{m_{01}}{m_{00}}\right)^q g(x, y)\, dx\, dy.$$

Этот вариант сводится к изменению системы координат таким образом, чтобы оси X и Y пересекались в центре тяжести объекта. Очевидно, что первые центральные моменты объекта μ_{10} и μ_{01} равны нулю. Вторые моменты μ_{20}, μ_{02} и μ_{11} представляют собой моменты инерции и аналогичны дисперсиям и ковариации функции распределения для двух переменных. Собственные векторы матрицы вторых центральных моментов задают направления, относительно которых объект имеет максимальный и минимальный моменты инерции. Собственные значения суть главные моменты, отношение которых описывает в некотором смысле толщину или тонкость объекта.

Глядя со стороны, мы можем интерпретировать метод моментов как своего рода уловку для осуществления того, чего нельзя осуществить простым разложением в ряд Тейлора характеристической функции объекта. Разложение в ряд Тейлора здесь «не работает» потому, что характеристическая функция множества «плохая»: она претерпевает разрыв непрерывности всюду вдоль границы множества. Однако функция с разрывами непрерывности, грубо говоря, имеет гладкий спектр Фурье, который представляет собой «хорошую» функцию и может быть разложен в степенной ряд. Порождающая моменты функция играет роль аналога спектра Фурье и позволяет нам получать описание объекта нужной информативности, отбирая все большее число коэффициентов разложения.

Теперь было бы поучительно обобщить исследованные нами способы описания объекта. Мы рассмотрели по крайней мере четыре различных метода получения полного описания: сам объект (т. е. как математический элемент характеристическую функцию объекта), спектр Фурье объекта (или функции интенсивности), скелетную пару объекта и его порождающую моменты функцию. Как правило, не особенно полезно просто заменять одно полное описание другим. В конечном счете информация в них одна и та же, а в видоизмененной форме она часто воспринимается с бóльшим трудом, чем в форме исходного объекта. Ценность преобразования одной формы описания в другую заключается прежде всего в том, что для другой формы некоторые операции упрощения могут оказаться особенно естественными или легко реализуемыми. Лучшим примером, возможно, служит преобразование Фурье, с помощью которого элегантную интерпретацию получают такие действия, как фильтрация и сравнение с эталоном. В случае скелетной пары для упрощения скелета можно естественным образом использовать функцию гашения.

Однако, что касается способов описания, для которых геометрическая интуиция и прозрение наталкиваются на бо́льшие трудности, то они, как правило, оказываются менее полезными в анализе сцен.

9.3.7. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ

Интегральная геометрия — это сформировавшаяся математическая дисциплина, имеющая дело с вычислением вероятностей разного рода случайных геометрических событий. Ее применение в задачах описания объектов представляется привлекательным по следующим соображениям. Пусть нам дан односвязный объект, со-

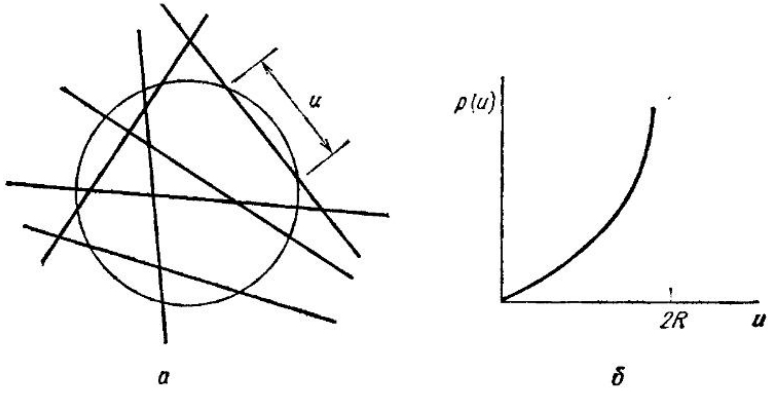


Рис. 9.27. Пересечение объекта случайными линиями. а) — случайные линии, пересекающие круг; б) — плотность распределения вероятности для длин хорд.

держащий одну компоненту. Представим себе эксперимент, в котором на сетчатку, где воспроизводится объект, бросают случайные линии. Предположим для конкретности, что нас интересуют две различные стороны эксперимента: во-первых, относительное число случайных линий, пересекающих объект, и, во-вторых, средняя длина хорды, вырезаемой объектом на пересекающих его линиях. Эти параметры, как и многие другие, подобные им, сильно зависят от вида объекта и, следовательно, могут использоваться для целей описания. Чтобы проиллюстрировать нашу мысль, на рис. 9.27, *а* показан круглый объект с наложенными на него несколькими случайными линиями. Распределение длин хорд, вырезанных кругом, изображено на рис. 9.27, *б*. Естественно предположить, что это распределение характеризует круглую форму объекта. Следовательно, параметры этого распределения, такие, как среднее и дисперсия, могут быть полезными для целей описания объекта.

Традиционный способ предупредить неосторожного исследователя о тонкостях предмета интегральной геометрии заключается в изложении известного *парадокса Бертрана*. Пусть мы взяли в ка-

честве объекта круг единичного радиуса и вычисляем вероятность того, что случайная хорда этого круга имеет бóльшую длину, чем сторона вписанного равностороннего треугольника. Это эквивалентно бросанию случайных (бесконечных) линий на сетчатку и вычислению условной вероятности того, что, если линия пересекает круг, длина ее хорды больше чем $\sqrt{3}$. Мы предлагаем читателю следующие решения.

Во-первых, вследствие симметрии мы можем без потери общности предположить, что треугольник можно построить таким образом, чтобы один из концов хорды совпадал с его вершиной. На рис. 9.28 ясно видно, что хорда может быть длинней стороны треугольника только в том случае, если другой ее конец лежит где-то на дуге, опирающейся на противоположную сторону. Следовательно, вероятность, которую мы ищем, в точности равна 1/3.

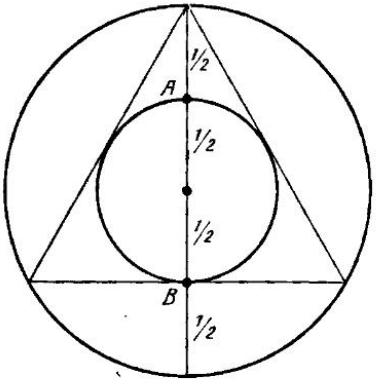


Рис. 9.28. Чертеж для иллюстрации парадокса Бертрана.

Во втором варианте (снова по соображениям симметрии) мы можем точно так же предположить, что ориентация хорды фиксирована, скажем она горизонтальна на рис. 9.28. Тогда, чтобы она была длинней стороны треугольника, она должна пересекать вертикальный диаметр где-либо между точками A и B. Поскольку все точки пересечения вертикального диаметра равновероятны, ответ должен быть равен 1/2.

И наконец, заметим, что всякая хорда единственным образом определяется основанием перпендикуляра, проведенного из центра круга. Следовательно, каждой точке круга соответствует единственная хорда. Если мы выберем точку, лежащую внутри концентрического круга половинного радиуса, то, как подсказывает рис. 9.28, соответствующая хорда будет длинней, чем сторона треугольника; в противном случае она будет короче. Поэтому вероятность, которую мы ищем, равна отношению площадей двух концентрических кругов, т. е. 1/4. Таким образом, у нас есть три прямых метода вычисления искомой вероятности, дающие ответы 1/3, 1/2 и 1/4.

Источник путаницы заключен в неоднозначности термина «бросать линию случайным образом». Чтобы уточнить этот термин, мы должны сначала задать параметры множества всех линий, а затем распределение вероятностей для этих параметров. Полученные выше различные ответы соответствуют различным способам, с помощью которых можно выполнить такую операцию. Не вводя каких-

либо дополнительных принципов, мы не можем сказать, что один из этих ответов правильный,— ясно лишь то, что они все различны. Принцип, к которому приходится обращаться при таких обстоятельствах, называется *инвариантностью*. Полное объяснение понятия инвариантности требует экскурса в теорию меры, без которого мы можем обойтись, но основная идея очень проста. Мы требуем, чтобы все наши результаты были инвариантны к переносам и вращениям объектов. Это значительно сужает возможности. Можно показать, что этому требованию удовлетворяет единственный способ задания параметров множества прямых линий: координаты (θ, ρ), обсуж-

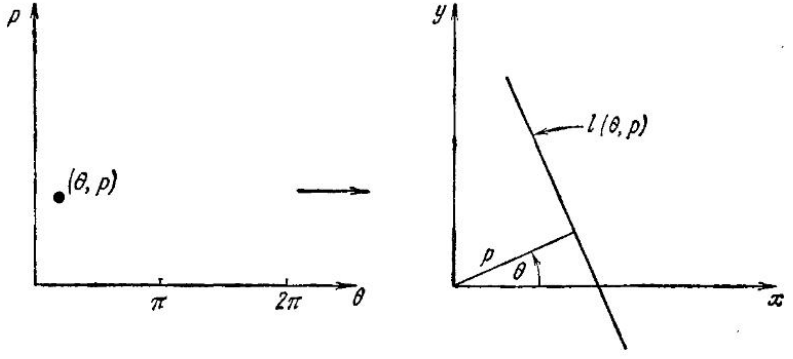


Рис. 9.29. Отображение точки на плоскости (θ, ρ) в линию на плоскости (X, Y).

давшиеся ранее. Говоря более конкретно, произвольная прямая на плоскости (X, Y) описывается с помощью перпендикуляра, проведенного из начала координат к этой линии (рис. 9.29). Длина перпендикуляра равна ρ, а угол, который он составляет с осью X, есть угол θ. Таким образом, каждой точке на плоскости (θ, ρ) соответствует прямая $l(\theta, \rho)$ на плоскости (X, Y). Чтобы дополнить наше описание «случайности», мы должны теперь задать распределение параметров θ и ρ. Здесь мы сталкиваемся с маленькой неприятностью. Если плоскость изображения считается бесконечной, величина ρ может принимать произвольно большие значения, и равномерное распределение задать нельзя [1]). К счастью, эту трудность легко обойти, договорившись с самого начала, что мы рассматриваем только линии, проходящие через сетчатку, которую предварительно определили. Это означает, что мы можем ограничить внимание таким подмножеством плоскости (θ, ρ), которое соответствует линиям $l(\theta, \rho)$, проходящим через сетчатку. Затем мы введем термин «случайным об-

[1]) Проблема здесь в точности такая же, как при попытке строго «выбрать случайным образом число среди всех вещественных чисел». Неопределенное выражение «случайным образом» обычно понимается в смысле «с равномерным распределением», и мы сталкиваемся с мистическим «равномерным распределением по всем вещественным числам».

разом», обозначая им равномерное распределение на этом множестве.

Используем эту формализацию для разрешения парадокса Бертрана. Зададим нашу сетчатку в виде круга единичного радиуса и вычислим вероятность того, что случайная линия, брошенная на сетчатку, имеет длину, равную по меньшей мере $\sqrt{3}$. Как показано на рис. 9.30, множество точек на плоскости (θ, ρ), которые соответствуют линиям, проходящим через круглую сетчатку, представляет собой прямоугольник высотой 1 и шириной 2π. Точки, лежащие в нижней половине прямоугольника, соответствуют хордам, превосходящим по длине $\sqrt{3}$, как мы убедились в предыдущих рассуждениях. Следовательно, ответ равен 1/2, поскольку распределение на плоскости (θ, ρ) равномерно в пределах большого прямоугольника.

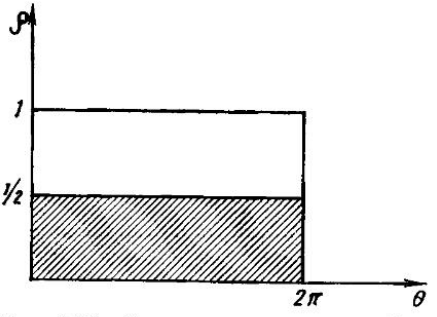


Рис. 9.30. Разрешение парадокса Бертрана.

Перечислим без доказательств некоторые свойства пересечений случайных линий с объектами. Полагаем всюду, что используются параметры θ и ρ, и поэтому перечисляемые свойства будут инвариантны к любым переносам и вращениям, которые полностью сохраняют объект внутри сетчатки. Мы должны заранее ожидать, что некоторые из этих свойств будут зависеть от самой сетчатки. Например, если сетчатка очень велика по сравнению с объектом, то только малая доля случайных линий, брошенных на сетчатку, будет вообще пересекать объект. В дальнейшем будем обозначать длину периметра сетчатки через R и будем считать, что объект состоит из одной просто связной компоненты с границей B. Наш первый результат определяет, насколько велика вероятность пересечения случайной линией объекта.

Результат 1: Вероятность того, что случайная линия пересечет объект, равна H/R, где H — длина периметра выпуклой оболочки границы.

У читателя не должно возникнуть трудностей с вопросом, почему искомая вероятность зависит от выпуклой оболочки границы; линия пересекает объект в том и только в том случае, если она пересекает его выпуклую оболочку. Таким образом, результат 1 представляет собой элегантную формулировку того интуитивно ясного факта, что чем больше объект (по сравнению с размером сетчатки), тем больше вероятность его пересечения случайной линией.

Второй результат относится к числу пересечений объекта случайной линией.

Результат 2: Ожидаемое число пересечений границы B одной линией равно $(2|B|)/R$, где $|B|$ — длина границы.

Это математическое ожидание зависит, конечно, от самой границы B, а не от H, поскольку, если граница B очень извилиста, линия, пересекающая ее хотя бы один раз, скорее всего пересечет ее много раз.

Последний результат, который мы хотим привести, относится к площади объекта.

Результат 3: Ожидаемая длина пересечения случайной линии с произвольным объектом пропорциональна площади объекта.

Перечисленные результаты типичны для методов интегральной геометрии. Ясно, однако, что эти результаты сами по себе не особенно полезны при описании объектов. Например, если мы хотим измерить длину границы объекта, есть, конечно, и более прямой метод, чем бросание случайной линии и использование результата 2 [1]). Мы получим несколько более полезное представление об интегральной геометрии, если расширим наши горизонты и ясно осознаем, что результат эксперимента по бросанию линии представляет собой наблюдение случайной величины. Наш интерес здесь проистекает из того факта, что распределение этой случайной величины зависит от объекта. Пока мы имели дело только со средним значением такой случайной переменной. Чтобы прояснить смысл этого различия, рассмотрим следующий пример.

Предположим, мы хотим узнать, какой из двух равновероятных объектов представлен на сетчатке. Для простоты примем, что решение может быть вынесено просто по площади объекта и что для вычисления площади предполагается использовать результат 3. Прямое применение результата 3 неминуемо влечет бросание достаточно большого числа линий, необходимых, чтобы точно оценить ожидаемую длину хорды пересечения. С другой стороны, предположим, что мы рассматриваем длину хорды пересечения как случайную величину, и пусть нам повезло настолько, что мы знаем наперед функцию плотности распределения этой случайной величины для каждого из двух объектов. Таким образом, на этой стадии возможно применение классической байесовской теории решений. Бросание единственной случайной линии порождает наблюдение, которое приписывается, как обычно, объекту с наименьшей апостериорной вероятностью ошибки. Конечно, возможен случай, когда бросание

[1]) Часто утверждают, что метод интегральной геометрии обладает преимуществом «выносливости». Малый разрыв в границе B создает трудности для алгоритма прослеживания кривых, но, по-видимому, не очень влияет на работоспособность метода бросания линий.

единственной линии дает неприемлемо высокую байесовскую вероятность ошибки. Это аналогично описанию образа с помощью не очень информативного набора признаков. Возможное средство заключается в бросании нескольких линий, каждая из которых приносит независимый голос за один из объектов, и в последующем подсчете голосов. Более сложный подход состоит в обращении к принципам теории последовательных решений. В данном случае теория последовательных решений указывает, какое из трех действий следует предпринять после получения результата бросания линии: отнести объект к типу 1, отнести его к типу 2 или же выполнить бросание другой линии. Как правило, при таком подходе среднее число бросаний линии, необходимое для получения заданной вероятности ошибки, минимально. Во всяком случае, существо дела здесь состоит в том, что в качестве характеристики объекта можно использовать полное распределение наблюдаемой случайной величины; следовательно, у нас здесь значительно больше гибкости, чем было бы, если бы мы ограничили наше внимание только средними значениями.

Прежде чем расстаться с методом интегральной геометрии, мы упомянем кратко два его расширения. Во-первых, в наших экспериментах по бросанию линий мы можем использовать более сложные наблюдения. Предположим, например, что все интересующие нас объекты настолько гладкие, что имеет смысл определить кривизну границы в каждой точке. Тогда при бросании линии мы можем наблюдать кривизну границы в точке пересечения. Эти наблюдения, как можно ожидать, должны быть связаны с общей кривизной границы объекта. Второе расширение метода заключается в бросании на сетчатку каких-либо кривых вместо прямых линий. Например, мы можем бросать сегменты линий (вместо бесконечных линий); данные, получаемые в этом эксперименте, могут быть связаны с углом между двумя прямыми линиями на сетчатке. Дальнейшие расширения мы предоставляем списку литературы и воображению читателя.

9.4. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

9.4.1. ОПИСАНИЕ ЛИНИИ

Первые работы по аппроксимации множества точек линией были, скорее всего, стимулированы потребностями ученых-экспериментаторов; простейший путь «объяснить» совокупность наблюдений состоит в том, чтобы связать зависимые и независимые переменные посредством уравнения прямой линии. Подбор линии по минимуму суммы квадратов ошибок и по собственному вектору дает два классических решения этой классической задачи. Мы должны отметить, что подбор линий по МСКО переходит также в ветвь статистики, называемую регрессионным анализом. Если не вдаваться в

подробности, все сводится к тому, что при соответствующих допущениях подбор по МСКО минимизирует ожидаемый квадрат расхождения между случайной переменной и так называемой линейной оценкой этой случайной переменной. Отношение между чисто числовым методом МСКО и статистическим методом часто называют теоремой Гаусса — Маркова (что показывает, насколько стар подбор по МСКО). Подробные сведения об этом можно найти в стандартных руководствах по статистике, таких, как книга Уилкса (1962).

Все другие методы подбора линий, обсуждаемые в этой главе, были разработаны для целей анализа изображений. Преобразование точки в кривую, описанное в п. 9.1.3, было предложено Дудой и Хартом (1972). Оно основано на преобразовании точки в прямую, представленном ранее Хохом в патенте США (1962) и введенном в более обычную техническую литературу Розенфельдом (1969). Некоторые методы, обсуждаемые в этой главе, насколько нам известно, в литературе не появлялись. О методе кластерного анализа сегментов линии из п. 9.1.3 нам сообщил Н. Дж. Нильсон; итеративный метод подбора концевой точки из п. 9.1.4 был подсказан нам Дж. Е. Форсеном. Идея разбиения границ объектов в точках большой кривизны основывается на очевидной важности этих точек для человеческого восприятия, что было установлено психологами, в частности Аттнивом (1954). Цань (1969) использовал этот подход для упрощения описаний кривых. Очень полезный метод цепного кодирования был разработан Фримэном (1961a, 1961b) и применен им же и его коллегами для решения таких задач, как головоломки типа «собирание картинки по кусочкам» (Фримэн и Гардер (1964)) и автоматическое сопоставление карт (Федер и Фримэн (1966)). Фримэн и Гласс (1969) использовали сплайны для исследования эффекта квантования при цепном кодировании кривых. Монтанари (1970a) создал итеративный метод для вычисления относительно гладкого приближения в виде ломаной для произвольной кривой, заданной в форме цепного кода. Монтанари (1970b) рассмотрел квантование кривых в общем случае и установил некоторые интересные предельные свойства. Наконец, мы должны упомянуть ценный обзор, подготовленный Левайном (1969), который охватывает общие проблемы получения описаний объектов.

9.4.2. ОПИСАНИЕ ФОРМЫ

Самые простые топологические свойства, обсуждавшиеся в разд. 9.3, использовались многими исследователями. Например, Гриниас и др. (1963) применяли топологические свойства для частичного описания знаков алфавита, написанных от руки в виде «печатных» букв и цифр. Фишлер (1963) использовал формулу Эйлера для проверки правильности описания объекта, полученного другими средствами. Мансон (1968) также использовал топологические

свойства для частичного описания «печатных» знаков алфавита, написанных от руки.

Теория линейных свойств была развита Минским и Пейпертом (1969) в попытке ответить на вопросы (наряду с многими другими) о способностях линейных схем к распознаванию образов. Эта общая проблема определения способностей данного класса абстрактных схем классифицировать образы была исследована также Блюмом и Хьюитом (1967), которые подошли к ней с точки зрения теории автоматов. Грей (1971) показал, что значительное число свойств объекта может быть вычислено с помощью правильно подобранных локальных операций, и описал специализированное вычислительное устройство для обработки изображений, реализующее эти операции. Ходс (1970) предложил измерять сложность некоторого свойства объекта, опираясь на размер логической формулы, необходимой для его определения.

Такие простые метрические свойства, как площадь, периметр, протяженность в заданном направлении и т. п., настолько фундаментальны, что они использовались в той или иной форме практически всеми исследователями, работавшими в данной области. Задача аппроксимации евклидовой метрики на квантованной плоскости изучалась Розенфельдом и Пфальцем (1968). Пойа и Сегё (1951) заинтересовались семейством физических следствий, проистекающих из того факта, что отношение толщины принимает максимальное значение для круга.

Описания объекта, основанные на выпуклой оболочке и дефиците выпуклости, по своей природе в определенной степени являются топологическими, и мы уже приводили некоторые представительные примеры их использования. Мансон (1968) описывает эффективную реализацию существенной стороны выдвинутой в п. 9.3.4 идеи нахождения выпуклой оболочки дискретного объекта. Скланский (1969) имеет дело с другим определением выпуклости на квантованной плоскости изображения. Согласно его определению, квантованный объект F считается выпуклым, если существует хотя бы один выпуклый неквантованный объект, квантованное представление которого есть F. Мейсон и Клеменс (1968) при опознавании знаков использовали гистерезисное сглаживание, которое является полезным во многих типах операций по обработке изображений.

Преобразование «степного пожара», или «средних осей», было первоначально разработано Блюмом (1967). Калаби и Хартнет (1968) имели дело с математическими деталями его применения для описания подмножеств двумерной плоскости. Монтанари (1968) разработал эффективный метод нахождения скелета квантованного объекта, сведя эту задачу к отысканию пути с минимальной стоимостью на графе. Монтанари (1969) построил метод определения скелета многоугольного объекта, основанный на аналитическом моделировании распространения.

Аналитический подход к описанию объекта использовался относительно небольшим числом исследователей, видимо, потому, что получаемые при нем коэффициенты разложения не всегда имеют ясную геометрическую интерпретацию. Брилл (1968) и Брилл и др. (1969) применяли разложение Фурье угловой естественной функции границы объекта. Более детальная и доступная обработка описана Цанем и Роскисом (1972). Аппроксимация с помощью моментов рассматривалась Ху (1962) и Альтом (1962).

Возможность применения интегральной геометрии для описания объектов была впервые указана в прекрасно написанной статье Новикова (1962). Некоторые из этих идей были обобщены Боллом (1962a, 1962b). Уонг и Стип (1969) объединили теорию последовательных решений с интегральной геометрией, существенно уменьшив тем самым число бросаний линии, необходимых при получении заданного описания. Кендалом и Мореном (1963) было написано хорошее математическое введение в предмет интегральной геометрии, которое содержит большую библиографию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Альт (Alt F. L.)
Digital pattern recognition by moments, *J. ACM*, **9**, 240—258 (April 1962).

Аттнив (Attneave F.)
Some informational aspects of visual perception, *Psychol. Rev.*, **61**, 183—193 (1954).

Блюм (Blum H.)
A transformation for extracting new descriptors of shape, in Symp. Models for Perception of Speech and Visual Form, pp. 362—380, Weiant Whaten-Dunn, ed. (MIT Press, Cambridge, Mass., 1967).

Блюм, Хьюит (Blum M., Hewitt C.)
Automata on a 2-dimensional tape, IEEE Conf. Record Eighth Ann. Symp. Switching and Automata Theory, IEEE, New York, 1967.

Болл (Ball G. H.)
An invariant input for a pattern-recognition machine, Ph. D. Thesis, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford, Calif. (1962a).

Болл (Ball G. H.)
The application of integral geometry to machine recognition of visual patterns, WESCON, Paper 6.3 (August 1962b).

Брилл (Brill E. L.)
Character recognition via Fourier descriptors, WESCON, Paper 25/3, Los Angeles (1968).

Брилл, Хейдорн, Хилл (Brill E. L., Heydorn R. P., Hill J. D.)
Some approaches to character recognition for postal address reader applications, Proc. Auto. Pattern Recog., pp. 19—40 (Nat. Security Industrial Assn., Washington, D. C., May 1969).

Грей (Gray S. B.)
Local properties of binary images in two dimensions, *IEEE Trans. Comp.*, **C-20**, 551—561 (May 1971).

Гриниас, Мигер, Норман, Изингер (Greanias E. C., Meagher P. F., Norman R. J., Essinger P.)
The recognition of handwritten numerals by contour analysis, *IBM Journal*, **7**, 14—21 (January 1963). [Русский перевод в журнале «Зарубежная радиоэлектроника», № 2, 1964.]

Дуда, Харт (Duda R. O., Hart P. E.)
Use of the Hough transformation to detect lines and curves in pictures, *Comm. ACM*, **15**, 11—15 (January 1972).

Калаби, Хартнет (Calabi L., Hartnett W. E.)
Shape recognition, prairie fires, convex deficiencies and skeletons, *Amer. Math. Monthly*, **75**, 335—342 (April 1968).

Кендал, Морен (Kendall M. G., Moran P. A. P.)
Geometrical probability, Charles Griffin and Company, London, 1963.

Левайн (Levine M. D.)
Feature extraction: a survey, *Proc. IEEE*, **57**, 1391—1407 (August 1969). [Русский перевод в журнале «Труды ИИЭР», **57**, № 8, 1969.]

Минский, Пейперт (Minsky M., Papert S.)
Perceptrons, MIT Press, Cambridge, Mass., 1969. [Русский перевод: Минский, Пейперт, Персептроны, «Мир», М., 1971.]

Монтанари (Montanari U.)
A method for obtaining skeletons using a quasi-Euclidean distance, *J. ACM*, **15**, 600—624 (October 1968).

Монтанари (Montanari U.)
Continuous skeletons from digitized images, *J. ACM*, **16**, 534—549 (October 1969).

Монтанари (Montanari U.)
A note on minimal length polygonal approximations to a digitized contour, *Comm. ACM*, **13**, 41—47 (January 1970a).

Монтанари (Montanari U.)
On limit properties in digitization schemes, *J. ACM*, **17**, 348—360 (April 1970b).

Мансон (Munson J. H.)
Experiments in the recognition of hand-printed text: part I — Character recognition, Proc. FJCC, pp. 1125—1138 (December 1968).

Мейсон, Клеменс (Mason S. J., Clemens J. K.)
Character recognition in an experimental reading machine for the blind, in Recognizing Patterns, pp. 156—167, Kolers P. A., Eden M., eds., MIT Press, Cambridge, Mass., 1968. [Русский перевод в сб. «Распознавание образов. Исследование живых и автоматических распознающих систем», «Мир», М., 1970.]

Новиков (Novikoff A. B. J.)
Integral geometry as a tool in pattern perception, in Principles of self-organization, pp. 347—368, Von Foerster and Zopf, eds., Pergamon Press, New York, 1962. [Русский перевод в сб. «Принципы самоорганизации», «Мир», М., 1966, стр. 428.]

Пойа, Серё (Pólya G., Szegö G.)
Isoperimetric inequalities in mathematical physics, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1951.

Розенфельд (Rosenfeld A.)
Picture processing by computer (Academic Press, New York, 1969). [Русский перевод: Розенфельд А., Распознавание и обработка изображений, «Мир», М., 1972.]

Розенфельд, Пфальц (Rosenfeld A., Pfaltz J. L.)
Distance functions on digital pictures, Pattern Recognition, **1**, 33—62 (July 1968).

Скланский (Sklansky J.)
Recognizing convex blobs, Proc. Int. Joint Conf. on Art. Int., pp. 107—116, Walker D. E., Norton L. M., eds. (May 1969).

Уилкс (Wilks S. S.)
Mathematical statistics, John Wiley, New York, 1962. [Русский перевод: Уилкс С., Математическая статистика, «Наука», М., 1967.]

Уонг, Стип (Wong E., Steppe J. A.)
Invariant recognition of geometric shapes, in Methodologies of Pattern Recognition, pp. 535—546, Watanabe S., ed., Academic Press, New York, 1969.
Федер, Фримэн (Feder J., Freeman H.)
Digital curve matching using a contour correlation algorithm, IEEE Intl. Conv. Rec., Pt. 3 (March 1966).
Фишлер (Fischler M. A.)
Machine perception and description of pictorial data, Proc. Int. Joint Conf. on Art. Int., pp. 629—639, Walker D. E., Norton L. M., eds. (May 1969).
Фримэн (Freeman H.)
On the encoding of arbitrary geometric configurations, *IRE Trans. Elec. Comp.*, **EC-10**, 260—268 (June 1961a).
Фримэн (Freeman H.)
Techniques for the digital computer analysis of chain-encoded arbitrary plane curves, 1961, Proc. Natl. Elec. Conf., 18, 312—324 (1961b).
Фримэн, Гардер (Freeman H., Garder L.)
Apictorial jigsaw puzzles: The computer solution of a problem in pattern recognition, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, **EC-13**, 118—127 (April 1964).
Фримэн, Гласс (Freeman H., Glass J. M.)
On the quantization of line-drawing data, *IEEE Trans. Sys. Sci. Cyb.*, **SSC-5**, 70—78 (January 1969).
Ходс (Hodes L.)
The logical complexity of geometric properties in the plane, *J. ACM*, **17**, 339—347 (April 1970).
Хок (Hough P. V. C.)
Method and means for recognizing complex patterns, US Patent 3069654 (December 18, 1962).
Ху (Hu M. K.)
Visual pattern recognition by moment invariants, *IRE Trans. Inf. Theory*, **IT-8**, 179—187 (February 1962).
Цань (Zahn C. T.)
A formal description for two-dimensional patterns, Proc. Int. Joint Conf. on Art. Int., pp. 621—628, Walker D. E. and Norton L. M., eds. (May 1969).
Цань, Роскис (Zahn C. T., Roskies R. Z.)
Fourier descriptors for plane closed curves, *IEEE Trans. Comp.*, **C-21**, 269—281 (March 1972).

Задачи

1. Пусть дано множество из n точек $\{(x_i, y_i)\}$, $i=1, \ldots, n$, на плоскости (X, Y), и мы хотим аппроксимировать точки кривой вида $\sum_{j=1}^{d} a_j \varphi_j(x)$, где величины $\varphi_j(x)$, $j=1, \ldots, d$, представляют собой произвольные заданные функции, а коэффициенты a_j, $j=1, \ldots, d$, следует определить. Найдите общее решение для коэффициентов, минимизирующих сумму квадратов расхождений (в направлении, параллельном оси Y) между множеством точек и кривой.

2. а) Покажите, что для вещественной симметричной матрицы S функция $\mathbf{v}^t S\mathbf{v}/\mathbf{v}^t\mathbf{v}$ вектора $\mathbf{v}$ минимальна (максимальна), если в качестве $\mathbf{v}$ взят собственный вектор, относящийся к наименьшему (наибольшему) собственному значению матрицы S.

б) Покажите для двумерного случая, что геометрическое место точек $\mathbf{x}$, удовлетворяющих равенству $\mathbf{x}^t S\mathbf{x}=c$, где c — положительная константа, представляет собой эллипс, оси которого совпадают с собственными векторами матрицы S.

3. а) Покажите, что преобразование точки в кривую, которое переводит точку (x, y) на плоскости изображения в кривую $\rho = x\cos\theta + y\sin\theta$ на плоскости парамет-

ров, обладает следующим свойством: точки, лежащие на одной кривой на плоскости параметров, соответствуют линиям, проходящим через одну точку на плоскости изображения.

б) Покажите, что метод двумерной гистограммы, описанный в тексте, эквивалентен следующему: для каждого квантованного значения величины θ все точки объекта проектируются на линию, проведенную под углом θ, и строится гистограмма этих проекций, причем размер ячейки этой гистограммы такой же, как и размер шага квантования величины ρ.

в) Покажите, что для обнаружения совокупностей точек, образующих окружности на плоскости изображения, можно использовать преобразование, переводящее каждую точку изображения в прямой круговой конус в трехмерном пространстве параметров.

4. Постройте алгоритм, распространяющий (однозначным образом) метод итеративного подбора концевых точек на простые замкнутые кривые.

5. а) Начертите на сетке кривую и запишите ее цепной код. Определите операцию над кодом, которая создает новый код, представляющий ту же самую кривую, увеличенную в два раза. Начертите кусочно линейную кривую, соответствующую масштабированному коду.

б) Теперь определите операцию над цепным кодом, которая поворачивает закодированную кривую на угол 45°. Примените эту операцию к коду, представляющему увеличенную версию исходной кривой. Начертите кусочно линейную кривую, соответствующую «повернутому цепному коду», на отдельном листе бумаги и сравните визуально эти две кусочно линейные кривые.

6. а) Докажите формулу Эйлера для многоугольных сетей, состоящих из одной связной компоненты без дыр. (Наводящее указание: используйте индукцию по числу линий.)

б) Распространите результат п. «а» на сети из произвольного числа связных компонент.

в) Распространите результат п. «б» на сети с дырами.

7. Покажите, что площадь произвольного многоугольника определяется формулой

$$A = \frac{1}{2} \sum_j (x_{j+1} y_j - x_j y_{j+1}),$$

где (x_j, y_j) — координаты j-й вершины многоугольника, а суммирование начинается с произвольной вершины и продолжается по часовой стрелке вокруг многоугольника, пока снова не будет достигнута исходная вершина.

8. Постройте алгоритм для отыскания выпуклой оболочки дискретного объекта.

9. Постройте алгоритм для реализации гистерезисного сглаживания произвольного замкнутого контура.

10. а) Начертите невыпуклый пятиугольник и нарисуйте приблизительно его скелет.

б) Предположим теперь, что мы хотим упростить скелет, исключив его части, вдоль которых огонь распространяется со скоростью, меньшей некоторого порога. Набросайте серию изображений, показывающих последовательные упрощения, которые получаются по мере того, как порог на скорость распространения возрастает.

в) Нарисуйте приблизительно объект, соответствующий каждому из скелетов п. «б».

11. Покажите, что угловая естественная функция $\hat{\theta}(s)$, определенная в тексте, является периодической функцией с периодом L и нулевым средним.

12. Покажите, что вероятность того, что случайная линия пересечет некоторую кривую C, равна отношению периметра выпуклой оболочки C к периметру сетчатки, на которой воспроизводится эта кривая.

Глава 10

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

10.1. ВВЕДЕНИЕ

До сих пор нас интересовала область, которую в связи с отсутствием лучшего наименования можно назвать анализом двумерных сцен. Это название означает, что мы не рассматривали никаких трехмерных соотношений ни между камерой и объектами сцены, ни между самими объектами. В некоторых случаях, например при оптическом опознавании знаков, такой строго двумерный подход вполне отвечает требованиям. Однако во многих интересных приложениях трехмерная природа объекта в сцене, или процесса съемки изображения, или и то и другое вместе имеют решающее значение. Например, фундаментальная проблема определения местоположения объекта относительно камеры принадлежит к области, которую мы будем называть (снова за неимением лучшего термина) анализом трехмерных сцен. В качестве второго примера укажем алгоритм, который разумным образом обрабатывает изображения, содержащие закрытые или частично загороженные объекты. Для такого алгоритма требуются по крайней мере элементарные понятия о трехмерных соотношениях. И наконец, возможности алгоритма анализа сцен часто могут быть расширены за счет использования определенных математических свойств процесса съемки изображения. Остальная часть книги будет посвящена главным образом анализу трехмерных сцен. Нас будут интересовать как методы ответа на вопросы, требующие сами по себе информации о трехмерной сцене, так и методы, которые используют информацию о трехмерной сцене в качестве вспомогательного средства для двумерного анализа, являющегося частью любого анализа сцен. Как и можно было бы предположить, оба вида задач решаются с помощью одной математической модели, на которую мы теперь и переносим наше внимание.

10.2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СЪЕМКИ ИЗОБРАЖЕНИЯ

Наша цель в настоящей главе заключается в обсуждении *перспективного преобразования*, которое представляет собой естественное приближение первого порядка к процессу съемки изображения. В конечном счете мы выведем и проиллюстрируем примерами некоторые полезные общие соотношения между точками в трехмерном пространстве и их изображениями (образами) на картинке. В дан-

ный же момент рассмотрим предмет исследования по возможности простейшим образом. Наша основная модель показана на рис. 10.1. Камера состоит из объектива с точечным отверстием и плоскости изображения, находящейся позади объектива на расстоянии f[1]). Изображение точки $\mathbf{v}$, лежащей в трехмерном пространстве, определяется пересечением плоскости изображения с проектирующим лучом, заданным точкой $\mathbf{v}$ и центром объектива. Мы будем далее

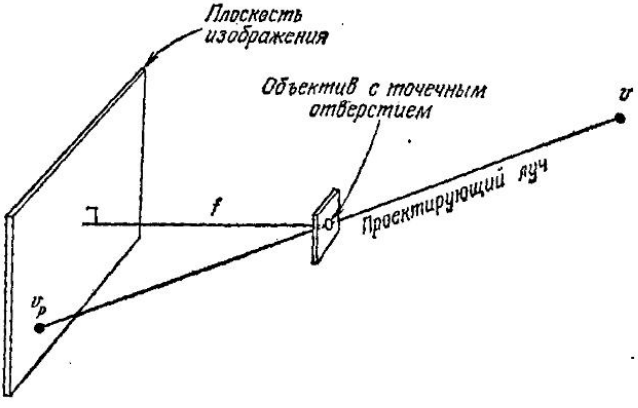


Рис. 10.1. Элементарная модель камеры.

всегда называть это пересечение $\mathbf{v}_p$ *точкой картинки* или *точкой изображения*, соответствующей *точке объекта* $\mathbf{v}$.

Хотя модель, показанная на рис. 10.1, правильно отображает ситуацию, она страдает маленьким недостатком: изображения перевернуты слева направо и сверху вниз. Чтобы избежать этого, мы перехватим проектирующий луч передней плоскостью изображения так, как показано на рис. 10.2. Эта передняя плоскость изображения может рассматриваться как плоскость, содержащая прозрачный диапозитив, в то время как задняя плоскость изображения содержит пленку-оригинал. Процесс, показанный на рис. 10.2, называется *центральным проектированием*, а точка объектива — *центром проекции*.

Иногда мы будем называть образ $\mathbf{v}_p$ *проекцией* точки $\mathbf{v}$ на плоскость картинки. На рис. 10.2 показана также система координат, удобная для процесса центрального проектирования. Мы совместили ось Y с *оптической осью* или *главным лучом* камеры. Главным лучом называется луч, идущий от объектива перпендикулярно к

[1]) Реальный объектив в настоящей фотографической или телевизионной камере всегда может быть заменен математически эквивалентным объективом с точечным отверстием, расположенным на соответствующем расстоянии от плоскости изображения.

плоскости изображения. Началом координат является пересечение главного луча с плоскостью изображения.

Процесс центрального проектирования отображает много точек в одну. Как показано на рис. 10.2, несмотря на то что каждой точке объекта соответствует одна четко определенная точка изображения, все точки объекта, расположенные на линии, которая проходит через центр объектива, имеют один и тот же образ. Таким образом, для каждой точки изображения существует в пространстве линия, определенная этой точкой изображения и центром объектива, и на этой линии должна лежать соответствующая точка объекта. Следо-

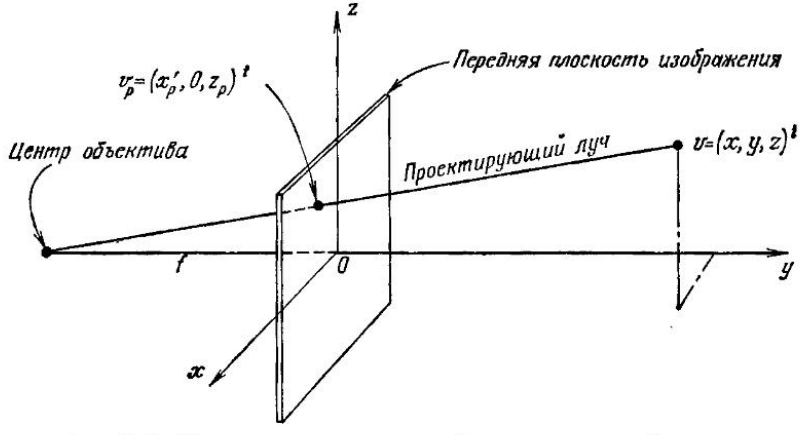


Рис. 10.2. Модель камеры с передней плоскостью изображения.

вательно, перед нами возникают два вопроса фундаментальной важности, связанные с процессом съемки изображения: для данной произвольной точки объекта определить местоположение ее образа и для данной произвольной точки изображения определить, где расположена прямая линия, на которой должна лежать соответствующая точка объекта. Ответы на эти вопросы могут быть даны с помощью прямого и обратного перспективных преобразований.

Выведем, опираясь на интуицию, формулы прямого перспективного преобразования для простого случая, изображенного на рис. 10.2. Оказывается, что для ответа достаточно лишь рассмотреть подобие треугольников. Если принять, что $\mathbf{v}=(x, y, z)^t$ и $\mathbf{v}_p=(x_p, y_p, z_p)^t$, тогда очевидно, что

$$\frac{x_p}{f}=\frac{x}{f+y}$$

$$y_p=0$$

и

$$\frac{z_p}{f}=\frac{z}{f+y},$$

или

$$x_p = \frac{fx}{f+y},$$
$$y_p = 0, \qquad (1)$$
$$z_p = \frac{fz}{f+y}.$$

Эти формулы особенно очевидны, если выбрать точку объекта или на плоскости (X, Y), или на плоскости (Y, Z), так как в этом случае легко обнаружить подобные треугольники. Заметим также, что выражения (1) могут быть переведены в форму

$$x = \frac{x_p}{f}(y+f) = \frac{x_p}{z_p} z, \qquad (2)$$

которая является уравнением прямой линии, проходящей через точку объектива $(0, -f, 0)^t$ и точку картинки $(x_p, 0, z_p)^t$. Таким образом, выражение (2) — это одна из форм обратного перспективного преобразования, так как для данной точки изображения $(x_p, 0, z_p)^t$ оно задает уравнение соответствующей линии в пространстве. В оставшейся части главы мы тщательно исследуем эти простые уравнения и получим некоторые результаты общего характера, полезные в анализе сцен.

10.3. ПЕРСПЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ В ОДНОРОДНЫХ КООРДИНАТАХ

10.3.1. ПРЯМОЕ ПЕРСПЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ

Математические соотношения для перспективных преобразований могут быть записаны в другой полезной форме, если мы сначала займемся вопросом представления векторов в *однородных координатах*. Основная идея заключается в том, чтобы превратить нелинейные преобразования формул (1) и (2) в линейные в другой системе координат. Заметим, что преобразование (1) не может быть линейным, так как координата Y точки объекта появляется в знаменателе. Имея это в виду, определим однородные координаты $\tilde{\mathbf{v}}$ точки $\mathbf{v} = (x, y, z)^t$ с помощью формулы $\tilde{\mathbf{v}} = (wx, wy, wz, w)^t$, где w — произвольная константа. Ясно, что действительные декартовы координаты точки $\mathbf{v}$ могут быть получены из ее однородных координат путем деления каждой из первых трех компонент однородного вектора на четвертую компоненту. Однородные координаты, как можно видеть, являются искусственным приемом для выполнения операции деления ценой увеличения размерности пространства на единицу. Заметим, что однородные векторы, различающиеся только масштабным множителем, представляют одну и ту же физи-

ческую точку. Таким образом, оба однородных вектора $\tilde{\mathbf{v}} = (wx, wy, wz, w)^t$ и $k\tilde{\mathbf{v}} = (kwx, kwy, kwz, kw)^t$ представляют одну и ту же физическую точку $\mathbf{v} = (x, y, z)^t$. Чтобы обозначать представление произвольного вектора в однородных координатах, мы будем всегда использовать тильду ($\sim$).

Выше мы предположили, что прямое перспективное преобразование, заданное формулами (1), является линейным, когда оно записано в однородных координатах. Теперь мы утверждаем, что при соответствующей интерпретации матрица

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{f} & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{3}$$

является действительно линейным преобразованием, которое переводит точку объекта (записанную в однородных координатах) в точку изображения (также записанную в однородных координатах); другими словами, мы утверждаем, что $\tilde{\mathbf{v}}_p = P\tilde{\mathbf{v}}$. Чтобы проверить правильность этого утверждения, выполним указанные вычисления. Мы получим, что для данной точки объекта $\tilde{\mathbf{v}} = (wx, wy, wz, w)^t$ соответствующая точка изображения (в однородных координатах) определяется формулой

$$\tilde{\mathbf{v}}_p = P\tilde{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} wx \\ wy \\ wz \\ \frac{wy}{f} + w \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Разделив каждую из первых трех компонент на четвертую, получаем декартовы координаты точки изображения в следующем виде:

$$\mathbf{v}_p = \begin{bmatrix} \frac{fx}{f+y} \\ \frac{fy}{f+y} \\ \frac{fz}{f+y} \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Заметим, что вторая компонента в формуле (5) не равна нулю во всех случаях, когда не равна нулю компонента Y точки объекта, и это не согласуется с физической реальностью, отображенной на рис. 10.2. Мы вскоре увидим, что вторая компонента точки изображения в математическом плане является свободной переменной в обратном перспективном преобразовании. В данный момент мы отло-

жим обсуждение роли второй компоненты и подчеркнем, что первая и третья компоненты в формуле (5) согласуются с результатами, полученными из подобия треугольников в выражении (1).

10.3.2. ОБРАТНОЕ ПЕРСПЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ

Обратимся теперь к обратному перспективному преобразованию. Вспомним, что, согласно нашему предположению, обратное преобразование определяет прямую линию, на которой должна лежать точка объекта, соответствующая данной точке изображения. Так как мы приняли, что прямое преобразование определено с помощью матрицы P, обратное преобразование формально определяется матрицей P^{-1}, т. е. из равенства (4) следует

$$\tilde{\mathbf{v}} = P^{-1}\tilde{\mathbf{v}}_p, \tag{6}$$

где P^{-1}, как легко убедиться, имеет вид

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{f} & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Предположим, что мы производим вычисления по формуле (6). Что нам следует использовать в качестве точки изображения $\mathbf{v}_p$ (и, следовательно, в качестве $\tilde{\mathbf{v}}_p$)? Из основной модели рис. 10. 2 мы знаем, что компонента Y точки изображения равна нулю. Однако, если принять $y_p=0$ и подставить $(wx_p,\ 0,\ wz_p,\ w)^t$ в формулу (6), мы найдем (после преобразования в обычные декартовы координаты), что $\mathbf{v}=(x_p,\ 0,\ z_p)^t$. Это вряд ли подойдет, поскольку мы хотим получить преобразование, которое переводит точку изображения в прямую линию, а не в одну точку. Выход из этого затруднения подсказывает выражение (5); из него следует, что вторая компонента точки изображения хотя и равна нулю физически, но математически она лежит в пределах интервала на оптической оси между плоскостью изображения и точкой объекта. Используя это наблюдение как подсказку, примем, что y_p— это свободная переменная, возьмем $\mathbf{v}_p=(x_p,\ y_p,\ z_p)^t$ и подставим в выражение (6) соответствующее однородное представление $\tilde{\mathbf{v}}_p=(wx_p,\ wy_p,\ wz_p,\ w)^t$. После вычислений по формуле (6) и перехода от однородных координат к обыкновенным с помощью обычного процесса деления мы по-

лучим

$$\mathbf{v}=\begin{bmatrix}\dfrac{fx_p}{f-y_p}\\[2ex]\dfrac{fy_p}{f-y_p}\\[2ex]\dfrac{fz_p}{f-y_p}\end{bmatrix}. \tag{8}$$

Мы знаем, что поскольку y_p— свободная переменная, для данных координат изображения x_p и z_p точка объекта v вычерчивает некоторую кривую в пространстве по мере изменения y_p. Форму этой кривой проще всего найти, исключив параметр y_p из трех уравнений в выражении (8)

$$x=\frac{fx_p}{f-y_p};\quad y=\frac{fy_p}{f-y_p};\quad z=\frac{fz_p}{f-y_p}. \tag{9}$$

После того как это сделано, получим

$$x=\frac{x_p}{f}(y+f)=\frac{x_p}{z_p}z, \tag{2}$$

что в точности соответствует уравнению (2), выведенному раньше. Следовательно, мы теперь знаем, что, если считать y_p свободной переменной, обратное перспективное преобразование в формуле (6) действительно переводит точку изображения в соответствующую прямую линию. Анализируя уравнения (9), мы видим, что при отрицательных значениях y_p точка объекта находится между объективом и плоскостью изображения; когда $y_p=0$, точка объекта совпадает с точкой изображения, и, наконец, если y_p приближается к величине f, точка объекта удаляется вдоль проектирующего луча в бесконечность.

Заметим попутно, что представление перспективного преобразования в однородиых координатах имеет как свои преимущества, так и недостатки. С одной стороны, оно позволяет нам выразить нелинейное преобразование в линейном виде, а это обстоятельство имеет некоторые приятные последствия в дальнейших исследованиях. С другой стороны, результатом этой операции является потеря математической чистоты; матрица P^{-1}, конечно, переводит точку изображения в соответствующую прямую линию (при использовании y_p в качестве свободной переменной), но матрица P переводит точку объекта в точку изображения только в том случае, если игнорировать вторую компоненту вектора. Мы могли бы, конечно, вычеркнуть вторую строку матрицы P и получить более простое прямое преобразование, но тогда матрица P^{-1} даже не существовала бы. Причина этого явления заключается в том, что матрица P отображает точку объекта в трехмерный вектор (после перехода к обыч-

ным координатам), одна из компонент которого не имеет никакого отношения к физической точке изображения, а связана с расстоянием от камеры до точки объекта. Общий вывод заключается в том, что однородное представление пригодно для использования, но применять его надо осторожно.

Обратное перспективное преобразование может быть переведено в другую полезную форму с помощью следующего простого анализа. Пусть $\mathbf{v}_l$— положение центра объектива, т. е. $\mathbf{v}_l=(0, -f, 0)^t$. Затем непосредственно из рис. 10.2 мы видим, что для любой точки $\mathbf{v}$, расположенной на проектирующем луче, может быть записано выражение

$$\mathbf{v}=\mathbf{v}_l+\lambda(\mathbf{v}_p-\mathbf{v}_l), \tag{10}$$

где λ— свободный параметр, значение которого берется среди неотрицательных вещественных чисел, а $\mathbf{v}_p$— действительная точка картинки $(x_p, 0, z_p)^t$. Мы можем выразить соотношение между λ и y_p, приравнивая любую компоненту векторного уравнения (10) и соответствующую компоненту из формулы (8), для того чтобы получить

$$\lambda=\frac{f}{f-y_p}, \tag{11}$$

или

$$y_p=\frac{f(\lambda-1)}{\lambda}.$$

Таким образом, если двигаться по лучу от центра объектива ($\lambda=0$) через плоскость картинки ($\lambda=1$) и далее во внешнее пространство, то значение y_p увеличивается монотонно от $-\infty$ до f, будучи отрицательным для точек позади плоскости картинки, нулевым для точек, расположенных на плоскости картинки, и положительным для точек, находящихся перед плоскостью картинки.

Подведем итоги нашему вводному обсуждению перспективных преобразований. Матрица P, заданная формулой (3), переводит точку объекта в соответствующую ей точку изображения; при этом обе точки представлены в однородных координатах. Настоящие координаты изображения задаются первой и третьей компонентами формулы (5). Матрица P^{-1} переводит точку изображения (представленную в однородных координатах) в точку объекта (также представленную в однородных координатах), которая пробегает по проектирующему лучу при изменении свободной переменной y_p. Уравнение этого луча представлено в параметрической форме выражением (2). Другой способ задания параметра, иногда более удобный, представлен в уравнении (10).

В следующем разделе мы распространим эти результаты на случай, представляющий гораздо больший практический интерес.

10.4. ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ С ДВУМЯ СИСТЕМАМИ ОТСЧЕТА

Преобразования, рассмотренные в предыдущем разделе, трудно использовать на практике из-за неприспособленности систем координат. Правда, одна система отсчета, изображенная на рис. 10.2, очень удобна для определения положений точек картинки; кроме

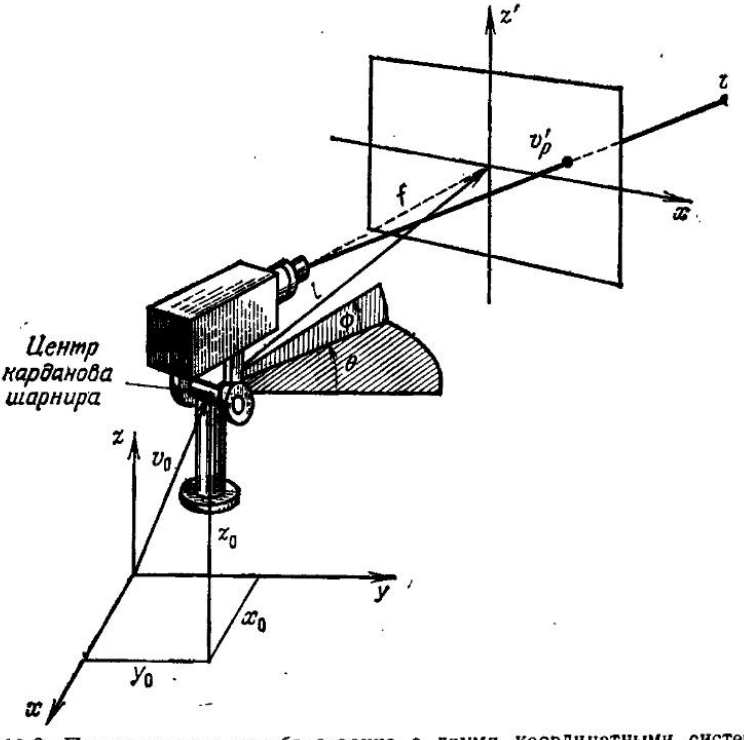


Рис. 10.3. Перспективное преобразование с двумя координатными системами.

того, она центрирована в центре плоскости изображения. В то же время, однако, единственная система координат весьма неудобна для определения положений точек объекта, так как она вынуждает нас измерять расстояние до ряда осей, расположение которых определяется камерой [1]). Другими словами, система, использованная в предыдущем разделе, является «камероцентрической», а это часто оказывается неестественным и неудобным. Для того чтобы исправить ситуацию, в идеальном случае нам необходимы две системы

[1]) Заметим, что, хотя в предыдущем обсуждении для упрощения математических операций использовались однородные координаты, все точки были физически представлены в единой системе декартовых координат.

координат: *система координат изображения*, в которой можно расположить точки картинки, и *глобальная*, или *мировая*, *система координат* для размещения всего остального. Рис. 10.3 иллюстрирует один из вариантов координатных систем, которые мы имеем в виду. Глобальная система отсчета, которая на рисунке обозначается буквами без штриха, используется для указания как положения камеры, так и точки объекта v. Камера перенесена относительно начала координат, повернута на угол θ и наклонена под углом φ. Точка изображения задается в системе координат изображения, помеченных штрихом на рис. 10.3; эта система совпадает с единственной системой отсчета, использованной в предыдущем разделе. В данном разделе мы будем использовать замену координат с тем, чтобы обобщить полученные ранее результаты на случай с двумя системами отсчета, показанный на рис. 10.3. Нашим окончательным результатом будет пара преобразований, в которых все величины заданы в системе координат, наиболее подходящей для их представления.

Прежде чем приступить к формальным операциям, мы хотели бы сделать одно замечание вспомогательного характера. Замена координат — это одна из таких процедур, которые, как известно, всегда можно выполнить, но мало кому нравится это делать. Поэтому нетерпеливый читатель может захотеть перейти сразу же к результатам, полученным в виде формул (18) и (26), убедившись сначала, что он понимает смысл геометрических параметров, описанных в следующем разделе. Для тех, кто интересуется подробностями, мы попытаемся свести до минимума путаницу, твердо придерживаясь следующих условий. Пусть символы со штрихом и без штриха будут представлять одну и ту же физическую точку, записанную со штрихом в системе координат изображения и без штриха в глобальной системе координат. Таким образом, оба символа v и v′ относятся к одной точке. Далее, с каждой из декартовых систем отсчета связано представление в однородных координатах, получаемое описанным выше стандартным образом. Мы по-прежнему будем использовать для обозначения тильду ($\sim$), так что оба символа $\tilde{\mathbf{v}}$ и $\tilde{\mathbf{v}}'$ относятся в конечном счете к одной и той же физической точке, а именно к точке, декартовы координаты которой суть v в глобальной системе (без штриха) и v′ в системе координат изображения.

10.4.1. ПРЯМОЕ ПЕРСПЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ: ДВЕ СИСТЕМЫ ОТСЧЕТА

Полное преобразование координат, которое мы хотим получить, представляет собой соответствие между глобальной системой координат (без штриха) и системой координат изображения (со штрихом). Для того чтобы определить это соответствие, мы должны оп-

ределить положение и ориентацию системы координат изображения по отношению к глобальной системе. Это может быть сделано с помощью следующих трех шагов. Сначала мы переносим глобальную систему в центр вращения камеры (который можно назвать центром карданова шарнира). Затем мы поворачиваем и наклоняем оси так, чтобы ось Y стала параллельной оптической оси камеры. (Полученная в результате этого система отсчета будет называться карданово системой координат.) И наконец, мы смещаем карданову систему отсчета из центра карданова шарнира в центр плоскости изображения. Введем несколько обозначений. Пусть $\mathbf{v}_0 = (x_0, y_0, z_0)^t$ будет вектор, проведенный из начала координат глобальной системы к центру карданова шарнира. Пусть θ — угол поворота камеры, измеряемый против часовой стрелки от оси Y, и пусть φ — угол наклона камеры, положительное значение которого отсчитывается вверх. Пусть вектор $\mathbf{l}$ изображает постоянное смещение между центром карданова шарнира и центром плоскости изображения, причем $\mathbf{l}$ измеряется в системе координат карданова шарнира [1]). Удобно записывать смещение $\mathbf{l}$ в виде $\mathbf{l} = (l_1, l_2+f, l_3)^t$, чтобы при совмещении центра карданова шарнира с центром объектива получалось $l_1 = l_2 = l_3 = 0$ и постоянное смещение величины f вдоль оптической оси. Для иллюстрации этих обозначений на рис. 10.3 схематически показаны вектор переноса $\mathbf{v}_0$ со всеми положительными компонентами, положительные углы поворота и наклона и вектор смещения, первая компонента которого равна нулю.

Для получения нужных нам результатов преобразование координат может быть реально осуществлено обычным способом. Однако преобразование будет особенно изящным, если обратиться к однородным координатам; при этом чистый перенос, который является нелинейной операцией в обычных декартовых координатах, становится линейным. В частности, легко проверить, что матрица

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -x_0 \\ 0 & 1 & 0 & -y_0 \\ 0 & 0 & 1 & -z_0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

переводит однородное представление вектора $(x, y, z)^t$ в однородное представление вектора $(x-x_0, y-y_0, z-z_0)^t$. Более того, операция чистого вращения, являющаяся линейным преобразованием в трехмерных декартовых координатах, остается линейной и в однород-

[1]) Строго говоря, следует использовать что-нибудь наподобие двух штрихов для того, чтобы указать, что вектор смещения измеряется в системе координат карданова шарнира.

ных координатах. Нетрудно проверить, что матрица

$$R = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 & 0 \\ -\cos\varphi\sin\theta & \cos\varphi\cos\theta & \sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi\sin\theta & -\sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

действительно является оператором вращения, который поворачивает на угол θ и наклоняет на угол φ. Другими словами, если даны однородные координаты $\tilde{\mathbf{v}}$ некоторой точки в глобальной системе отсчета, то произведение $R\tilde{\mathbf{v}}$ дает однородные координаты той же самой точки в системе координат изображения, повернутой на угол θ и наклоненной на угол φ. Наконец, матрица G для реализации смещения относительно карданова шарнира определяется аналогично выражению (12) следующим образом:

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -l_1 \\ 0 & 1 & 0 & -(l_2+f) \\ 0 & 0 & 1 & -l_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{14}$$

Следовательно, полное изменение системы отсчета, представленное в однородных координатах, выражается произведением матриц GRT. Придерживаясь договоренности о тильдах и штрихах, мы напишем

$$\tilde{\mathbf{v}}' = GRT\tilde{\mathbf{v}}. \tag{15}$$

Здесь мы уже близки к конечной цели. Когда все точки представлены в координатах изображения, перспективное преобразование само по себе не вызывает никаких трудностей, как мы это видели в предыдущем разделе. Переписав формулу (4) со штрихами для того, чтобы обозначить координаты изображения, получим

$$\tilde{\mathbf{v}}'_p = P\tilde{\mathbf{v}}'. \tag{16}$$

Объединив изменение координат (15) с перспективным преобразованием (16), получим

$$\tilde{\mathbf{v}}'_p = PGRT\tilde{\mathbf{v}}. \tag{17}$$

Преобразование (17) является формальным решением нашей задачи. Оно отображает точку объекта, представленную в однородных глобальных координатах, в точку изображения, представленную в однородных координатах картинки, со всеми геометрическими характеристиками камеры в качестве параметров.

Хотя выражение (17) является удобной для некоторых приложений формой, мы сможем установить ряд интересных и полезных фактов, если действительно выполним вычисления и затем преобразуем

результат в обычные декартовы координаты. А именно представим себе, что у нас есть точка объекта $\mathbf{v}=(x, y, z)$ и мы хотим найти ее образ (x'_p, z'_p) (припомним из предыдущего раздела, что только первая и третья компоненты точки изображения имеют значение). Подставив однородное представление $\tilde{\mathbf{v}}=(wx, wy, wz, w)^t$ в формулу (17) и разделив первую и третью компоненты результирующего вектора на четвертую компоненту, мы получим результат, имеющий большое значение:

$$x'_p = f\frac{(x-x_0)\cos\theta+(y-y_0)\sin\theta-l_1}{-(x-x_0)\cos\varphi\sin\theta+(y-y_0)\cos\varphi\cos\theta+(z-z_0)\sin\varphi-l_2},$$
$$z'_p = f\frac{(x-x_0)\sin\varphi\sin\theta-(y-y_0)\sin\varphi\cos\theta+(z-z_0)\cos\varphi-l_3}{-(x-x_0)\cos\varphi\sin\theta+(y-y_0)\cos\varphi\cos\theta+(z-z_0)\sin\varphi-l_2}. \quad (18)$$

Обсуждение этих внушительных выражений будет отложено до тех пор, пока мы не получим аналогичные выражения для обратного преобразования.

10.4.2. ОБРАТНОЕ ПЕРСПЕКТИВНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ: ДВЕ СИСТЕМЫ ОТСЧЕТА

В общем случае обратное перспективное преобразование в однородных координатах может быть получено особенно легко из прямого преобразования (17). Так как каждая из четырех матриц имеет обратную,

$$\tilde{\mathbf{v}}=T^{-1}R^{-1}G^{-1}P^{-1}\tilde{\mathbf{v}}'_p. \quad (19)$$

Легко убедиться, что

$$T^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&0&x_0\\0&1&0&y_0\\0&0&1&z_0\\0&0&0&1\end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$G^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&0&l_1\\0&1&0&l_2+f\\0&0&1&l_3\\0&0&0&1\end{bmatrix} \quad (21)$$

и

$$R^{-1}=R^t. \quad (22)$$

Как мы это уже делали для прямого преобразования, полезно оценить выражение (19) и перевести результат в обычные декартовы координаты путем деления каждой из первых трех компонент $\tilde{\mathbf{v}}$ на четвертую. Как обычно, пусть $\tilde{\mathbf{v}}'_p=(wx'_p, wy'_p, wz'_p, w)^t$, где y'_p — свободный параметр. После утомительных вычислений мы получим точ-

ку v объекта в следующем виде:

$$\mathbf{v}=\frac{1}{f-y'_p}\begin{bmatrix}(fx'_p-l_1y'_p+l_1f)\cos\theta+(l_2y'_p-l_2f-f^2)\cos\varphi\sin\theta- \\ -(l_3y'_p-fz'_p-l_3f)\sin\varphi\sin\theta \\ (fx'_p-l_1y'_p+l_1f)\sin\theta-(l_2y'_p-l_2f-f^2)\cos\varphi\cos\theta+ \\ +(l_3y'_p-fz'_p-l_3f)\sin\varphi\cos\theta \\ -(l_2y'_p-l_2f-f^2)\sin\varphi-(l_3y'_p-fz'_p-l_3f)\cos\varphi\end{bmatrix}+ \\ +\begin{bmatrix}x_0\\y_0\\z_0\end{bmatrix}. \quad (23)$$

Здесь снова обратное преобразование может быть переведено в более удобную форму посредством представления точки v объекта в виде

$$\mathbf{v}=\mathbf{v}_l+\lambda(\mathbf{v}_p-\mathbf{v}_l), \quad (10)$$

причем центр объектива $\mathbf{v}_l$ можно найти, устремив y'_p к $-\infty$ в формуле (23), а точку $\mathbf{v}_p$ изображения (представленную в глобальных координатах) можно найти при $y'_p=0$. Оценив формулу (23) для этих значений, найдем

$$\mathbf{v}_p=\begin{bmatrix}x_0\\y_0\\z_0\end{bmatrix}+ \\ +\begin{bmatrix}(x'_p+l_1)\cos\theta-(f+l_2)\cos\varphi\sin\theta+(z'_p+l_3)\sin\varphi\sin\theta \\ (x'_p+l_1)\sin\theta+(f+l_2)\cos\varphi\cos\theta-(z'_p+l_3)\sin\varphi\cos\theta \\ (f+l_2)\sin\varphi+(z'_p+l_3)\cos\varphi\end{bmatrix} \quad (24)$$

и

$$\mathbf{v}_l=\begin{bmatrix}x_0\\y_0\\z_0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}l_1\cos\theta-l_2\cos\varphi\sin\theta+l_3\sin\varphi\sin\theta \\ l_1\sin\theta+l_2\cos\varphi\cos\theta-l_3\sin\varphi\cos\theta \\ l_2\sin\varphi+l_3\cos\varphi\end{bmatrix}. \quad (25)$$

Комбинируя формулы (10), (24) и (25), придем к нашему конечному выражению, задавая проектирующий луч для точки изображения (x'_p, z'_p), для свободного неотрицательного параметра λ и для всех геометрических параметров камеры:

$$\mathbf{v}=\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_0+l_1\cos\theta-l_2\cos\varphi\sin\theta+l_3\sin\varphi\sin\theta \\ y_0+l_1\sin\theta+l_2\cos\varphi\cos\theta-l_3\sin\varphi\cos\theta \\ z_0+l_2\sin\varphi+l_3\cos\varphi\end{bmatrix}+ \\ +\lambda\begin{bmatrix}x'_p\cos\theta-f\cos\varphi\sin\theta+z'_p\sin\varphi\sin\theta \\ x'_p\sin\theta+f\cos\varphi\cos\theta-z'_p\sin\varphi\cos\theta \\ f\sin\varphi+z'_p\cos\varphi\end{bmatrix}. \quad (26)$$

Перечислим результаты этого раздела. Мы обобщили простую проективную модель на случай с двумя системами координат таким образом, что все величины могут теперь быть измерены естественным путем. Формулы (17) и (19) задают прямое и обратное перспективные преобразования в однородных координатах, где однородные координаты точки изображения и точки объекта связаны соответственно с декартовыми координатами изображения и с декартовыми глобальными координатами. Формулы (18) и (26) задают преобразования непосредственно в декартовой системе координат изображения и в декартовой глобальной системе координат. В следующем разделе мы проиллюстрируем эти результаты, применяя их во многих различных ситуациях.

10.5. ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ

10.5.1. КАЛИБРОВКА КАМЕРЫ

Все перспективные преобразования, описанные в предыдущих разделах, включают некоторые геометрические параметры. Даже в самом простом случае, чтобы преобразование было определено полностью, должно быть известно расстояние f от плоскости изображения до объектива с точечным отверстием. В более общем случае нам необходимо также знать величины параметров переноса, вращения и смещения. Хотя в принципе эти параметры могут быть измерены непосредственно, на практике обычно удобнее определить по крайней мере некоторые из них, используя саму камеру в качестве измерительного инструмента. Основная идея заключается в том, чтобы присвоить параметрам такие значения, которые сведут до минимума разницу между измеренными и вычисленными положениями точек картинки.

Предположим далее, что у нас имеется фотографический отпечаток изображений нескольких точек, глобальные координаты которых известны. Пусть задан набор $\{\mathbf{v}_i\}$, $i=1, \ldots, n$, из n точек объекта, и пусть $\{\mathbf{v}'_{pi}\}$, $i=1, \ldots, n$, — соответствующие им изображения. Теперь возьмем формулу (18), которая выражает координаты точки изображения через координаты точки объекта и геометрические параметры. Запишем (18) в функциональной форме следующим образом:

$$\mathbf{v}'_p = \mathbf{h}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\pi}),$$

где $\mathbf{h}$ — вектор-функция, дающая вычисленные координаты картинки для образа точки $\mathbf{v}$, а $\boldsymbol{\pi}$ — вектор параметров. Его компоненты суть геометрические параметры, которые должны быть определены. Один очевидный способ определить эти параметры заключается в выборе вектора $\boldsymbol{\pi}$ таким образом, чтобы вычисленные положения $\mathbf{h}(\mathbf{v}_i, \boldsymbol{\pi})$ изображений точек были близки их действительным поло-

жениям $\mathbf{v}'_{pi}$, например так, чтобы сумма

$$\sum_{i=1}^{n} \| \mathbf{v}'_{pi} - \mathbf{h}(\mathbf{v}_i, \pi) \|^2$$

была минимальна. Минимизация может быть реализована различными путями. Предположим в качестве очень простого примера, что единственным незаданным параметром является величина f — расстояние от объектива с точечным отверстием до плоскости изображения. Это число только устанавливает масштаб результирующего изображения; удвоение f удваивает размер изображения, в чем можно убедиться как из анализа подобных треугольников, так и по формуле (18). Следовательно, значение f может быть найдено аналитически путем минимизации функции ошибок и с использованием любого числа точек объекта и изображения в качестве входной информации. В более общем случае, когда число незаданных параметров велико, функция ошибок минимизируется численно с помощью методов поиска по градиенту. (В разд. 12.3 мы опишем метод разумного выбора начальной точки для градиентного поиска.)

10.5.2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ОБЪЕКТА

Мы видели, что в общем случае положение точки объекта не определяется однозначно ее фотографическим изображением. Единственное, что может быть сказано, это то, что точка объекта лежит где-то на проектирующем луче, определенном центром объектива и точкой изображения. В некоторых случаях, однако, мы можем располагать некоторыми дополнительными априорными сведениями о точке объекта, соответствующей данной точке изображения. Например, мы можем знать расстояние от камеры до точки объекта, или мы можем знать, что точка объекта лежит на некоторой стене, полу или на другой определенной поверхности. Так как проектирующий луч — это однопараметрическая система, любая такая априорная информация может быть использована вместе с точкой изображения, чтобы определить однозначно положение точки объекта.

В качестве примера упомянутой выше ситуации предположим, что мы хотим определить положение точки объекта, причем заранее известно, что она лежит на полу. Для простоты мы примем, что плоскость (X, Y) глобальной системы координат совпадает с полом, и поэтому наша априорная информация состоит из единственного факта, что координата Z точки объекта равна нулю. Предположим снова для простоты, что центр вращения камеры находится в центре объектива, и поэтому вектор смещения $\mathbf{l}$ равен нулю. Так как точка объекта лежит на полу, третья компонента формулы (26) должна быть нулевой; следовательно, мы можем сначала найти величину

λ, приняв $z=0$, и затем подставить эту величину снова в формулу (26), чтобы найти неизвестные координаты X и Y точки v[1]). Если мы сделаем это, то найдем, что

$$x = x_0 - \frac{z_0 x'_p \cos\theta + (z'_p \sin\varphi - f\cos\varphi)(z_0 \sin\theta)}{z'_p \cos\varphi + f\sin\varphi},$$

$$y = y_0 - \frac{z_0 x'_p \sin\theta - (z'_p \sin\varphi - f\cos\varphi)(z_0 \cos\theta)}{z'_p \cos\varphi + f\sin\varphi}.$$

10.5.3. ВЕРТИКАЛЬНЫЕ ЛИНИИ: ПЕРСПЕКТИВНОЕ ИСКАЖЕНИЕ

Изображения обладают несколькими интересными свойствами, которые могут быть выведены путем применения прямого преобразования (18) в простых физических ситуациях. Для нашей теперешней цели нам не нужна полная общность формулы (18); эффект, который мы хотим показать, можно продемонстрировать даже в том случае, когда все параметры, характеризующие положение камеры, равны нулю, за исключением одного угла наклона φ. В соответствии с этим мы возьмем $x_0=y_0=z_0=l_1=l_2=l_3=\theta=0$ и преобразуем выражение (18) в более простую форму:

$$\begin{aligned} x'_p &= \frac{fx}{y\cos\varphi + z\sin\varphi}, \\ z'_p &= \frac{-fy\sin\varphi + fz\cos\varphi}{y\cos\varphi + z\sin\varphi}. \end{aligned} \tag{27}$$

Исследуем свойства изображения вертикальной линии. Вертикальная линия объекта вычерчивается точкой объекта

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z \end{bmatrix},$$

где x_1 и y_1 — координаты точки, в которой линия пересекает плоскость пола, и z — свободный параметр, значение которого берется среди всех вещественных чисел. Если мы подставим v в формулу (27) и исключим свободный параметр z из двух уравнений, то получим уравнение прямой линии на плоскости изображения[2]):

$$z'_p = \left(\frac{-y_1}{x_1 \sin\varphi}\right) x'_p + \frac{f}{\operatorname{tg}\varphi}. \tag{28}$$

---

[1]) Идея использования точки, лежащей на полу, для определения положения объекта была разработана Робертсом (1965), который назвал заложенное в ней предположение *гипотезой об опоре*.

[2]) Из элементарного рассуждения видно, что проективное преобразование переводит прямые линии в прямые; поэтому можно сразу предположить, в какой форме будет получен результат.

Анализ этого простого уравнения дает целый ряд интересных наблюдений. Наиболее важным является то, что точка пересечения с осью Z' не зависит от положения самой вертикальной линии; она зависит только от того, действительно ли линия вертикальна. Таким образом, для данной геометрии камеры образы всех вертикаль-

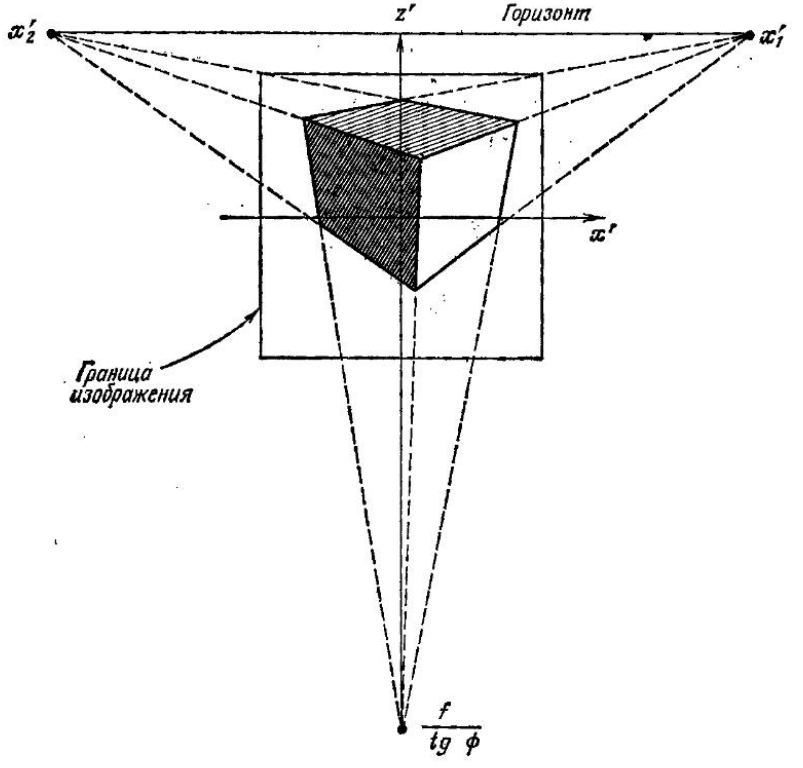


Рис. 10.4. Точки схода.

ных линий проходят через одну *точку вертикального схода*, координаты которой на изображении равны $(0, f/\mathrm{tg}\,\varphi)$. Рис. 10.4 иллюстрирует этот эффект на изображении единственного прямоугольного параллелепипеда, снятом камерой, сильно наклоненной вниз ($\varphi<0$). Читатель может проверить и другие свойства уравнения (28), которые согласуются с интуицией. Например, если $|\varphi|$ увеличивается от нуля до 90°, точка вертикального схода передвигается к центру плоскости изображения, и наклон линии становится более пологим. Точно так же для любого заданного угла наклона камеры этот эффект становится более заметным, когда вертикальные линии объекта передвигаются к периферии поля зрения (т. е. когда

$|x_1|$ становится большим по сравнению с y_1). Итак, точка вертикального схода может быть определена только по параметрам камеры, и она накладывает простое необходимое условие на изображения вертикальных линий.

10.5.4. ГОРИЗОНТАЛЬНЫЕ ЛИНИИ И ТОЧКИ ГОРИЗОНТАЛЬНОГО СХОДА

В качестве последнего примера использования перспективных преобразований исследуем некоторые свойства изображения горизонтальной линии. Для простоты мы будем рассматривать изображение линии объекта, лежащей на плоскости пола глобальной системы координат. Любая точка объекта $\mathbf{v}=(x, y, z)^t$, лежащая на такой линии, имеет вид $(x, mx+b, 0)^t$, где m и b — соответственно наклон линии и длина отрезка, отсекаемого этой линией на координатной оси Y. Так как мы хотим снять изображение объекта, расположенного на полу, лучше, чтобы камера была поднята над полом и, может быть, направлена вниз. В соответствии с этим мы возьмем геометрические параметры камеры в виде $x_0=y_0=l_1=l_2=l_3=\theta=0$, и пусть величина z_0 будет положительной, а φ — отрицательной. Для этих параметров прямое преобразование (18) упрощается следующим образом:

$$\begin{aligned} x'_p &= \frac{fx}{y\cos\varphi+(z-z_0)\sin\varphi}, \\ z'_p &= \frac{-fy\sin\varphi+f(z-z_0)\cos\varphi}{y\cos\varphi+(z-z_0)\sin\varphi}. \end{aligned} \tag{29}$$

После подстановки $(x, mx+b, 0)^t$ в формулы (29) и исключения свободного параметра x из двух уравнений мы получим уравнение прямой линии на плоскости изображения

$$z'_p = \frac{-mz_0x'_p+f(b\sin\varphi+z_0\cos\varphi)}{z_0\sin\varphi-b\cos\varphi}. \tag{30}$$

Не существует никаких особенно простых свойств ни у наклона этой линии изображения, ни у точек ее пересечения с координатными осями; рассмотрим, однако, пересечение этой линии изображения с *линией горизонта* данной картинки. Линия горизонта любого изображения определяется как пересечение плоскости изображения с плоскостью, проходящей через центр объектива параллельно полу. Как показано на боковой проекции рис. 10.5, уравнение линии горизонта (в координатах изображения) имеет вид $z'=-f\operatorname{tg}\varphi$. Очевидно, что координата X' точки пересечения линии изображения (30) с линией горизонта определяется приравниванием выражения (30) величине $-f(\operatorname{tg}\varphi)$. Решив полученное уравне-

ние относительно координаты точки пересечения с горизонтом x'_h, находим, что

$$x'_h = \frac{f}{m \cos \varphi}. \tag{31}$$

Этот результат можно было бы также получить посредством подстановки $(x, mx+b, 0)$ в первое уравнение выражения (29) и перехода к пределу при x, стремящемся к бесконечности. Следовательно, точка пересечения с горизонтом вполне заслуженно называется *точкой горизонтального схода* или *точкой схода с горизонтом* изображения данной линии; это предел, к которому стремится точка изоб-

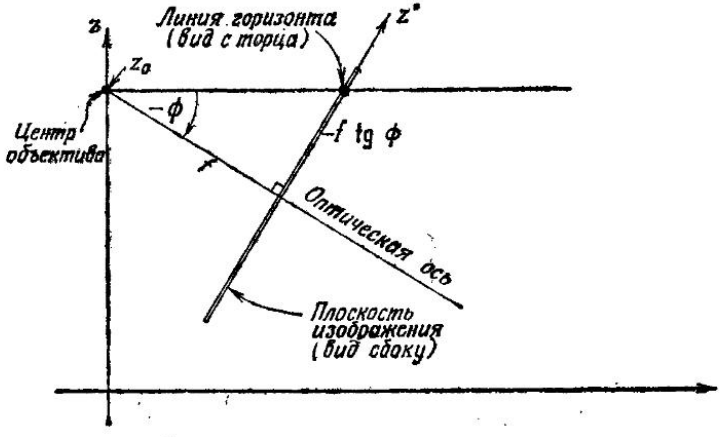


Рис. 10.5. К расчету линии горизонта.

ражения в то время, как точка объекта удаляется в бесконечность вдоль прямой линии $y=mx+b$.

Мы можем сделать ряд интересных замечаний по поводу выражения (31). Во-первых, заметим, что точка схода не зависит от высоты z_0 камеры над плоскостью, содержащей линию объекта. Во-вторых, точка схода не зависит от параметра переноса b в уравнении линии объекта. Следовательно, мы можем сделать важный вывод, что любые две линии, параллельные плоскости пола, имеют одну и ту же точку схода в том и только том случае, если они параллельны друг другу. И наконец, предположим, что у нас есть две ортогональные линии объекта, лежащие на плоскости, параллельной полу. Пусть их наклоны будут m_1 и m_2, а их точки схода с горизонтом имеют координаты x'_1 и x'_2. Поскольку эти линии ортогональны, $m_1 m_2 = -1$. Следовательно, непосредственно из формулы (31) мы получаем

$$x'_1 x'_2 = \frac{-f^2}{\cos^2 \varphi}. \tag{32}$$

Две точки схода x_1' и x_2' иногда называют *сопряженными точками схода* [1]). Так как их произведение — отрицательная величина, они всегда лежат по разные стороны от центральной линии изображения, как показано на рис. 10.4. Сопряжённые точки схода являются примером того, каким образом заданное ограничение на объекты (а именно ортогональность) может быть преобразовано в простое ограничение на изображения.

10.6. СТЕРЕОСКОПИЧЕСКОЕ ВОСПРИЯТИЕ

Несколько раз мы подчеркивали, что перспективное преобразование — это процесс отображения многих точек в одну, и поэтому заданная точка изображения не определяет однозначно положение соответствующей ей точки объекта. Стандартный метод получения

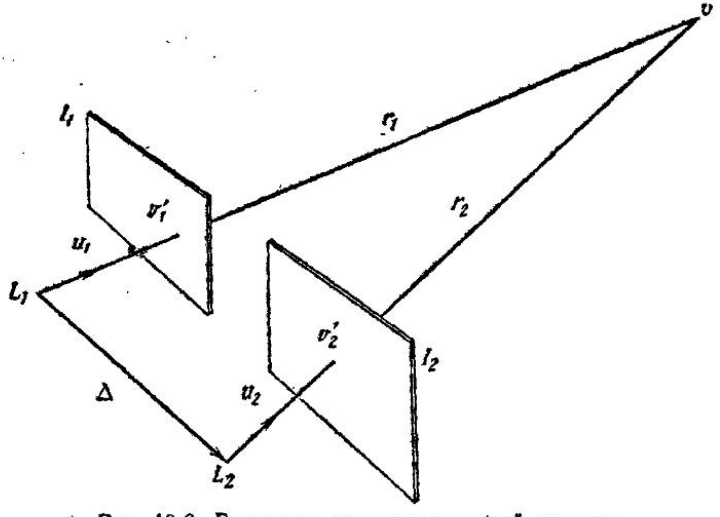


Рис. 10.6. Геометрия стереоскопической системы.

дополнительной информации, необходимой для достижения однозначности, называется *стереоскопией* и основывается на использовании двух изображений. Основная схема для стереоскопии или стереоскопического восприятия иллюстрируется рис. 10.6. Мы здесь показали две плоскости изображения I_1 и I_2, два центра объективов $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ и два проектирующих луча r_1 и r_2, проведенных между соответствующими центрами объективов и точкой $\mathbf{v}$ объекта. Мы приняли, что векторы $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$ — это единичные векторы, построенные в на-

[1]) Строго говоря, x_1' и x_2' — только координаты точек схода по оси X'. Мы игнорируем это различие, потому что для данного изображения линия горизонта, а следовательно, и ее координата по оси Z' фиксированы.

правлении проектирующих лучей. Вектор $\Delta = \mathbf{L}_2 - \mathbf{L}_1$ называется *базовым вектором*; его длина называется просто *базой*. Для упрощения обе системы координат — глобальная и местная — на рис. 10.6 не показаны.

Очевидно, что вычисления, связанные со стереоскопией, состоят из двух отдельных частей. Во-первых, должно быть определено расположение двух точек изображения $\mathbf{v}_1'$ и $\mathbf{v}_2'$, соответствующих точке $\mathbf{v}$ объекта. Во-вторых, необходимо выполнить тригонометрические вычисления, чтобы найти точку пересечения двух проектирующих лучей. Остановимся кратко на первом требовании, которое часто называют *задачей определения соответствия*. Обычно это требование удовлетворяется одним из двух способов. Наиболее прямой способ состоит в том, чтобы просто определить, используя то или иное средство, положение образа точки $\mathbf{v}$ на каждой картинке. Однако часто легче определить положение образа точки $\mathbf{v}$ на одной из картинок, а затем использовать процедуру сравнения с эталоном, чтобы обнаружить соответствующий образ на другой картинке. В частности, предположим, что сначала определяется положение точки $\mathbf{v}_1'$. Затем, поскольку мы ищем точку (или небольшую область) плоскости I_2, которая соответствует точке $\mathbf{v}_1'$, мы используем в качестве эталона небольшую область плоскости I_1 с центром в точке $\mathbf{v}_1'$. Эталон, построенный таким образом, перемещается по плоскости I_2 до тех пор, пока не будет найдено соответствие. Заметим, однако, что рис. 10.6 подсказывает существенное упрощение: точка $\mathbf{v}_1'$ всегда лежит на плоскости, определяемой точками $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$ и $\mathbf{v}_1'$. Следовательно, эталон необходимо перемещать только вдоль линии, определяемой пересечением этой плоскости с плоскостью изображения. Далее, координата X' точки $\mathbf{v}_2'$ должна быть всегда алгебраически меньше, чем та же координата точки $\mathbf{v}_1'$; в противном случае проектирующие лучи сходились бы позади плоскостей изображения (это означало бы, что точка объекта находится позади камер). Таким образом, эталон необходимо перемещать только по небольшому участку плоскости I_2, и этим объясняется удобство данного метода во многих задачах.

Обратимся теперь к тригонометрической задаче определения точки пересечения двух проектирующих лучей. В идеальном случае существуют два числа, скажем a и b, такие, что $a\mathbf{u}_1 = \Delta + b\mathbf{u}_2$. После нахождения таких чисел можно было бы просто положить $\mathbf{v} = \mathbf{L}_1 + a\mathbf{u}_1$. Однако мы можем принять на веру, что на практике два проектирующих луча не пересекутся из-за различных ошибок. Разумное средство в этом случае заключается в том, чтобы поместить точку $\mathbf{v}$ на полпути между двумя проектирующими лучами в месте их наибольшего сближения. Переходя к формулам, мы полагаем

$$\mathbf{v} = \frac{a_0\mathbf{u}_1 + (\Delta + b_0\mathbf{u}_2)}{2} + \mathbf{L}_1, \tag{33}$$

где a_0 и b_0— значения a и b, минимизирующие величину

$$J(a, b)=\|a\mathbf{u}_1-(\Delta+b\mathbf{u}_2)\|^2. \tag{34}$$

Отметим как особый случай, что если проектирующие лучи действительно пересекаются, то минимальное значение $J(a, b)$ равно нулю, $a_0\mathbf{u}_1=\Delta+b_0\mathbf{u}_2$ и $\mathbf{v}=a_0\mathbf{u}_1+\mathbf{L}_1$. С помощью элементарных вычислений можно легко проверить, что величина $J(a, b)$ минимизируется при

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\mathbf{u}_1\cdot\Delta-(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{u}_2)(\mathbf{u}_2\cdot\Delta)}{1-(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{u}_2)^2}, \\ b_0 &= \frac{(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{u}_2)(\mathbf{u}_1\cdot\Delta)-(\mathbf{u}_2\cdot\Delta)}{1-(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{u}_2)^2}. \end{aligned} \tag{35}$$

Остается задать вектор $\mathbf{L}_1$ (положение центра первого объектива) и два единичных вектора $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$ в направлении проектирующих лучей. Эти величины можно определить, вспомнив наше обсуждение обратного перспективного преобразования. Положение объектива произвольной камеры задается выражением (25). Вектор, направленный вдоль проектирующего луча, определяется с помощью разности $\mathbf{v}_p$—$\mathbf{L}$, где глобальные координаты точки $\mathbf{v}_p$ изображения заданы формулой (24). Следовательно, в формулах (33) и (35) мы полагаем

$$\mathbf{u}_i=\frac{\mathbf{v}_{p_i}-\mathbf{L}_i}{\|\mathbf{v}_{p_i}-\mathbf{L}_i\|}, \tag{36}$$

где, конечно, индекс i обозначает точки изображения и объектива двух камер.

Итоги всего сказанного сводятся к тому, что положение точки $\mathbf{v}$ объекта, соответствующей двум заданным точкам $\mathbf{v}'_{p_1}$ и $\mathbf{v}'_{p_2}$ изображения, определяется выражением (33), где a_0 и b_0 задаются формулами (35). Два единичных вектора $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$ могут быть получены путем подстановки формул (24) и (25) в выражение (36).

Уравнение (33), которое мы можем назвать уравнением стереоскопии или триангуляционным уравнением, обычно используется просто для того, чтобы установить положение точки объекта, соответствующей определенной паре точек изображения. Однако оно может быть также использовано для более глубокого проникновения в природу процесса съемки изображения. Чтобы проиллюстрировать это, используем формулу (33) для исследования вопроса о том, как влияет квантование изображения на точность триангуляции. Вообразим эксперимент, в котором два изображения одной точки $\mathbf{v}$ объекта получены двумя различными камерами. Пусть каждое изображение квантованно, так что истинные точки изображения заменены центральными точками элементов сетки, в которые они попали. Если точка объекта, соответствующая квантованным точкам изображения, определена с помощью формулы (33), результирующий вектор будет в общем случае отличаться от первоначальной точ-

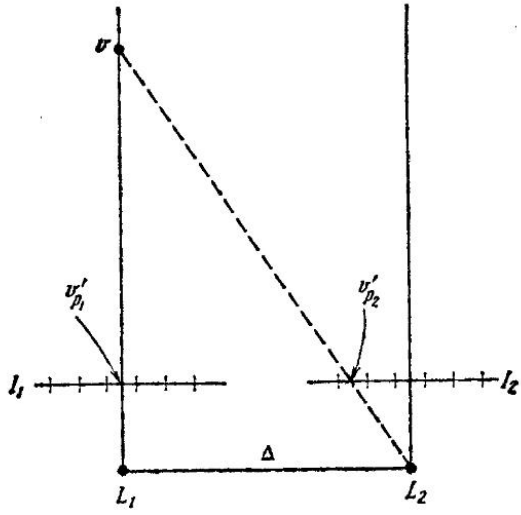


Рис. 10.7. Чертеж к эксперименту со стереосистемой.

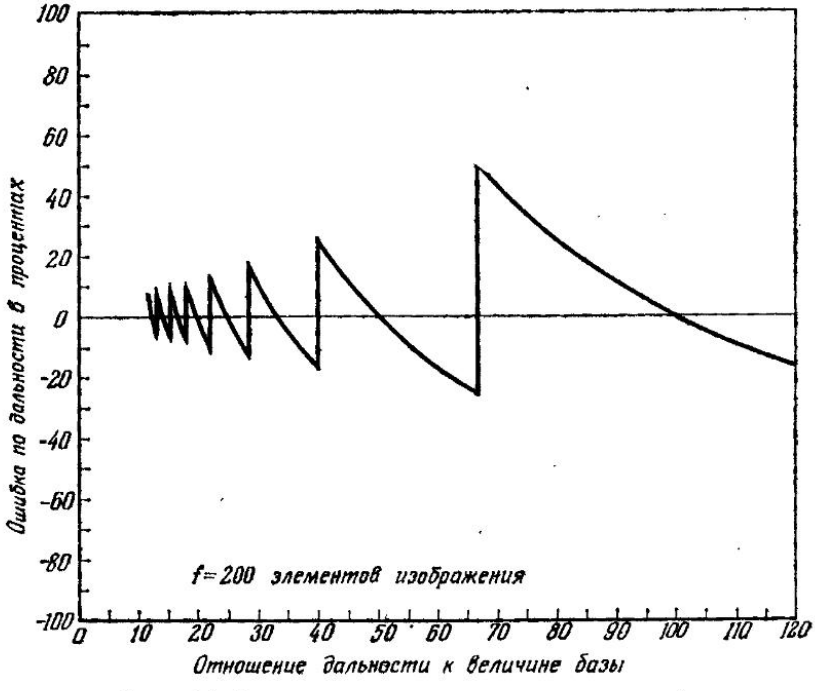


Рис. 10.8. Результат эксперимента со стереосистемой.

ки v объекта. Возможной мерой этой разности является величина ошибки по дальности, выраженная в процентах, причем дальность определяется как расстояние от точки объекта до середины базовой линии. Интуитивно ясно, что процент ошибки по дальности будет обычно увеличиваться при возрастании истинной дальности, потому что с увеличением истинной дальности проектирующие лучи становятся почти параллельными, и небольшие ошибки, как правило, будут иметь серьезные последствия. В соответствии с этим рассмотрим эксперимент, в котором точка объекта отодвигается дальше и дальше от камер; для простоты мы всегда можем удерживать точку объекта на оптической оси первой камеры, гарантируя тем самым, что ошибка квантования будет иметь место только на втором изображении. Вид сверху на такую схему показан на рис. 10.7. При реальной постановке этого эксперимента плоскость изображения была произвольно квантована с помощью сетки, размер ячейки которой равнялся $f/200$; результат эксперимента изображен на рис. 10.8. Любопытный зубчатый вид кривой ошибки легко объясняется с помощью рис. 10.7. Когда точка v объекта удаляется вдоль проектирующего луча первой камеры, ее образ передвигается слева направо по второй плоскости изображения. Квантованный образ поэтому сначала находится справа, а затем слева от истинного образа, что делает проектирующие лучи сначала чересчур параллельными, а затем чересчур сходящимися. В результате вычисленное положение точки объекта сначала находится слишком далеко (область положительной ошибки), а затем слишком близко (область отрицательной ошибки). И наконец, по мере удаления точки объекта точка изображения входит в следующую ячейку квантования, и процесс повторяется, но со значительно бо́льшим размахом колебаний, так как проектирующие лучи становятся еще более параллельными.

10.7. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Нашей целью в настоящей главе было представление перспективных преобразований в форме, приемлемой для использования в анализе сцен. Эта тема, собственно говоря, является частью проективной геометрии, т. е. предмета, корни которого уходят по крайней мере к 1639 г., ко времени Дезарга, и который систематически разрабатывали в XIX в. такие знаменитые геометры, как Понселе, Мёбиус, Плюккер, Штейнер и фон Штаудт. Несмотря на то что существует большое число современных введений в проективную геометрию, например монографии, написанные Коксетером (1961) и Грауштейном (1963), их точка зрения совершенно отличается от нашей и материал несколько разбросан для читателя, интересующегося анализом сцен. Фотограмметристы подобным же образом имеют собственный интерес к перспективным преобразованиям, но

центральные проблемы, стоящие перед ними, вынуждают их использовать методы, не представляющие для нас в настоящее время интереса. Читателям, интересующимся широким кругом вопросов фотограмметрии, рекомендуется монументальный труд «Руководство по фотограмметрии» [1]); Гош (1968) обсуждает математические вопросы стереофотограмметрии.

Исключив из своего внимания обширную литературу по проективной геометрии и фотограмметрии, мы можем предложить лишь небольшой список литературы, трактующий вопросы перспективных преобразований с точки зрения анализа сцен. Робертс (1965) ввел эти преобразования в область распознавания образов в своей классической работе по автоматическому восприятию трехмерных сцен; в наших разработках мы в основном следовали его концепциям. В неопубликованном докладе Харта (1969) о стереоскопических расчетах обсуждается чувствительность процесса триангуляции к ошибкам, вызванным поворотом, наклоном и квантованием. Собел (1970) имел дело с задачей калибровки камеры.

Причиной интереса к перспективным преобразованиям и к связанным с этим вопросом темам является также желание воспроизводить трехмерные объекты на связанных с вычислительными машинами дисплеях. Эйгуя и Кунс (1968) предлагают перечень примеров использования перспективных преобразований при работе с дисплеем. Уорнок (1968), Лоутрел (1970) и Букнайт (1970) предлагают алгоритмы для решения так называемой «задачи удаления невидимых линий», связанной с воспроизведением на дисплее трехмерных объектов.

В течение многих лет психологи изучают процесс восприятия человеком изображений трехмерных сцен. Несмотря на то что эти исследования часто не приводят непосредственно к созданию методов автоматического анализа изображений, они дают интересный вспомогательный материал. Мы предлагаем три особенно хорошо написанные книги по этим вопросам. Грегори (1970) представляет доказательства важности информации о глубине для зрительного восприятия человека и иллюстрирует свою точку зрения трехмерными изображениями. Пиренн (1970) проводит сугубо нематематическое обсуждение перспективного преобразования и использует много фотографических отпечатков, полученных с помощью камеры с точечным объективом, для иллюстрации его свойств. И наконец, Юлеш (1971) описывает много замечательных явлений, раскрытых с помощью стереограмм набора случайных точек, которые наглядно иллюстрируют процессы восприятия, происходящие при работе более глубоких центров головного мозга.

---

[1]) Manual of Photogrammetry, 3-е издание (в 2 томах), изданное Американским обществом фотограмметрии, Вашингтон, 1966. (Не указаны ни автор, ни редактор.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Букнайт (Bouknight W. J.)
A procedure for generation of three-dimensional half-toned computer graphics presentations, *Comm. ACM*, **13**, 527—536 (September 1970).
Гош (Ghosh S. K.)
Theory of stereophotogrammetry, Ohio State University, Department of Geodesic Science, Columbus, Ohio, 1968.
Грауштейн (Graustein W. C.)
Introduction to Higher Geometry, Macmillan, New York, 1963.
Грегори (Gregory R. L.)
The Intelligent Eye, McGraw-Hill, New York, 1970. [Русский перевод: Грегори Р., Разумный глаз, «Мир», М., 1972.]
Коксетер (Coxeter H. S. M.)
The Real Projective Plane, Cambridge University Press, Cambridge, 1961.
Лоутрел (Loutrel P. P.)
A solution to the hidden-line problem for computer-drawn polyhedra, *IEEE Trans. Comp.*, **C-19**, 205—213 (March 1970).
Пиренн (Pirenne M. H.)
Optics, Painting and Photography, Cambridge University Press, New York, 1970.
Робертс (Roberts L. G.)
Machine perception of three-dimensional solids, in Optical and Electro-Optical Information Processing, pp. 159—197, J. T. Tippett, et al., eds., MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1965. [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», «Мир», М., 1973, стр. 162—208.]
Собел (Sobel Irwin)
Camera models and machine perception, Stanford Artificial Intelligence Project, Memo AIM-121, Computer Science Department, Stanford University (May 1970).
Уорнок (Warnock J. E.)
A hidden-line algorithm for halftone picture representations, Tech. Rept. 4—5, Department of Computer Science, University of Utah, Salt Lake City, Utah (May 1968).
Харт (Hart P. E.)
Stereographic perception of 3-dimensional scenes, Final report, SRI Project 7642, Stanford Research Institute, Menlo Park, California (August 1969).
Эйгуя, Кунс (Ahuja D. V., Coons S. A.)
Geometry for construction and display, *IBM Systems Journal*, **7**, № 3—4, 188—205 (1968).
Юлеш (Julesz B.)
Foundations of Cyclopean Perception, University of Chicago Press, Chicago and London, 1971.

Задачи

1. Покажите, что общая билинейная функция трех переменных x, y и z может быть записана как линейное преобразование x, y, z и w, если используются однородные координаты.

2. Покажите аналитически, что произвольная линия в пространстве проектируется на заданную плоскость изображения также в виде линии.

3. Обобщите формулу (18) на случай, когда камера имеет возможность вращаться вокруг своей оптической оси.

4. Пусть параметры переноса камеры x_0 и y_0, а также угол поворота θ неизвестны. Покажите, как можно эти параметры определить аналитически (т. е.

без поиска) по картинке, изображающей произвольную линию и лежащую в плоскости пола точку, положение которых известно.

5. Определите с помощью численного расчета или аналитически ошибку по дальности, возникающую, когда две стереокамеры, оптические оси которых должны быть параллельны, оказываются в действительности смещенными на 1°.

6. Пусть точка объекта в трехмерном пространстве освещается источником света так, что тень от нее падает на какую-то поверхность (стену, пол и т. п.). Покажите, как можно определить положение точки в трехмерном пространстве по единственной картинке, содержащей точку и ее тень, если положения источника света и поверхности известны.

Глава 11

ПРОЕКТИВНЫЕ ИНВАРИАНТЫ

11.1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из фундаментальных проблем в анализе сцен заключается в том, чтобы распознавать случаи, когда два данных изображения показывают один и тот же объект. Эта проблема достаточно широка, чтобы допускать возможность многих различных видов решений в зависимости от того, что считается точно известным с самого начала. Если известна трехмерная структура объекта, то проблема сводится

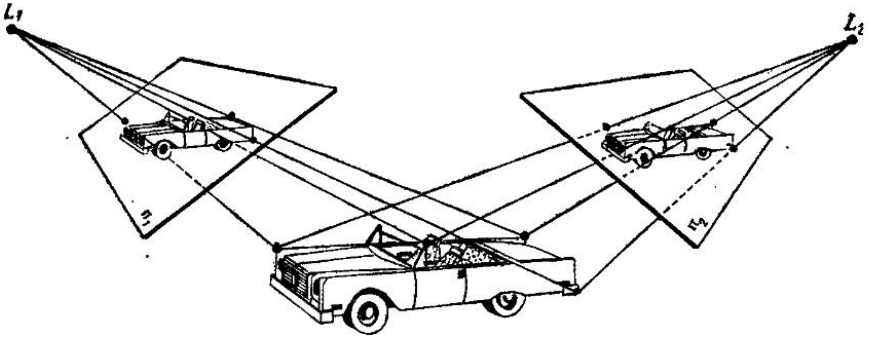


Рис. 11.1. Два изображения одного и того же объекта.

к проверке, действительно ли каждое изображение показывает знакомый объект. Если трехмерная структура заранее не известна, то мы можем попробовать опереться на такие признаки объектов, которые не изменяются от картинки к картинке. Такие признаки называются *проективными* или *проективными инвариантами*, и они являются предметом наибольшего внимания в данной главе.

Для того чтобы сделать конкретным наше вводное обсуждение проективных инвариантов, мы продолжим его с помощью примера. Пусть у нас есть две фотографии, и на обеих снят автомобиль (рис. 11.1). Наша задача состоит в том, чтобы решить, изображена ли одна и та же машина на обеих картинках. Возможен случай, когда между двумя картинками имеются очевидные различия. Например, одна машина может иметь четыре двери, а другая две. Мы будем интересоваться различиями более тонкими и исключим такие очевидные случаи из обсуждения. Нас будут интересовать случаи, когда

задачу можно решить только подробным анализом процесса съемки изображения. Чтобы иметь дело с задачей, поставленной математически, мы сделаем важное предположение о том, что каждая картинка представлена конечным множеством отобранных характерных точек. В иллюстративном примере с автомобилем отобранными точками могут быть концы крыльев (точнее, их образы), концы бамперов, центры колес и т. п. Точно так же мы будем считать, что и сам объект может быть представлен соответствующими характерными точками. Другими словами, мы примем, что изображение состоит из конечного числа помеченных точек в двумерном пространстве, а объект представляет собой конечное множество помеченных точек в трехмерном пространстве.

Прежде чем переходить к обсуждению специальных методов, мы должны подчеркнуть фундаментальную неоднозначность, присущую проблеме узнавания одного и того же объекта на двух изображениях. Даже если две фотографии идентичны, мы не можем строго доказать, что они являются фотографиями одного и того же физического объекта. Например, одна может быть фотографией картины с объектом, а другая фотографией самого объекта. С другой стороны, можно точно обнаруживать случаи, когда две фотографии показывают различные объекты. Эта неоднозначность связана с природой перспективного преобразования, отображающего много точек в одну. Как мы видели в предыдущей главе, существует бесконечное множество объектов, которые все отображаются в одну и ту же картинку при центральном проектировании. Следовательно, самое большее, на что мы можем надеяться,— это обнаруживать случаи, когда два данных изображения показывают различные объекты. Если для данной пары изображений этого установить нельзя, то мы можем лишь сделать вывод, что, *может быть*, обе картинки показывают один и тот же объект. Выражаясь формальным языком, мы можем надеяться вывести только необходимые, но не достаточные условия того, что два изображения показывают один и тот же объект.

В общем в этой главе предметом нашего интереса является в основном следующая абстрактная задача: для двух данных изображений вывести необходимые условия того, что они представляют собой две центральные проекции одного и того же объекта, причем считается, что и изображения, и объекты состоят из конечного числа помеченных точек. Эту задачу мы будем называть *задачей второго ракурса*. На протяжении всей главы будем считать, что относительные положения и ориентации камер неизвестны [1]). Следовательно, задача состоит в том, чтобы найти признаки объектов, которые не

[1]) Заметим, что если положения камер известны, то, как подсказывает рис. 11.1, задача сводится просто к определению, пересекаются ли соответствующие лучи в пространстве.

изменяются от картинки к картинке, другими словами, найти проективные инварианты.

Задача второго ракурса привлекала сравнительно малое внимание исследователей, работавших в области анализа сцен, и нам неизвестны универсально применимые решения. Тем не менее эта задача приводит нас к исследованию фундаментальных математических свойств проективной модели, и поэтому представляется целесообразным описать некоторые оказавшиеся плодотворными методы.

11.2. СЛОЖНОЕ ОТНОШЕНИЕ

Проективный инварнант фундаментальной важности известен под различными названиями: *сложное, двойное* или *ангармоническое отношение*. Как мы вскоре увидим, сложное отношение само по себе связано с «одномерными изображениями». Однако оно может быть

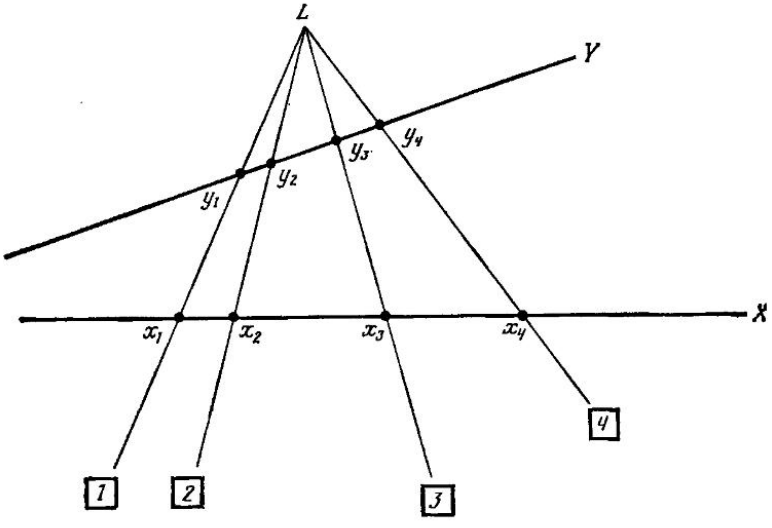


Рис. 11.2. Пучок из четырех линий, пересекающих два ряда точек.

включено в двумерный случай и поэтому представляет для нас большой интерес. Введем сначала несколько основных терминов.

Любое множество линий, проходящих через одну точку, называется *пучком линий* или просто *пучком*. На рис. 11.2 показан пучок, состоящий из четырех линий 1, 2, 3, 4, лежащих в одной плоскости; общая точка L называется *центром пучка*. Подобным же образом всякое множество точек, лежащих на одной линии, называется *рядом точек* или просто *рядом*. На рис. 11.2 показаны два ряда точек, x_1, x_2, x_3, x_4 и y_1, y_2, y_3, y_4, лежащих соответственно на линиях X и Y. Как правило, мы не хотим делать различие между обозначением

прямой и обозначением ряда точек, и в случае рис. 11.2 мы говорим о двух рядах X и Y. Ряды X и Y являются двумя *сечениями* пучка с центром в L и, как говорят, находятся в *перспективном соответствии* (или просто *перспективны*). Заметим, что рис. 11.2 можно интерпретировать как модель процесса съемки одномерного изображения одномерного объекта, в которой X представляет собой объект, Y — изображение, а L — центр объектива. Рассмотрим теперь рис. 11.3. Ряды X и Y находятся в перспективном соответствии,

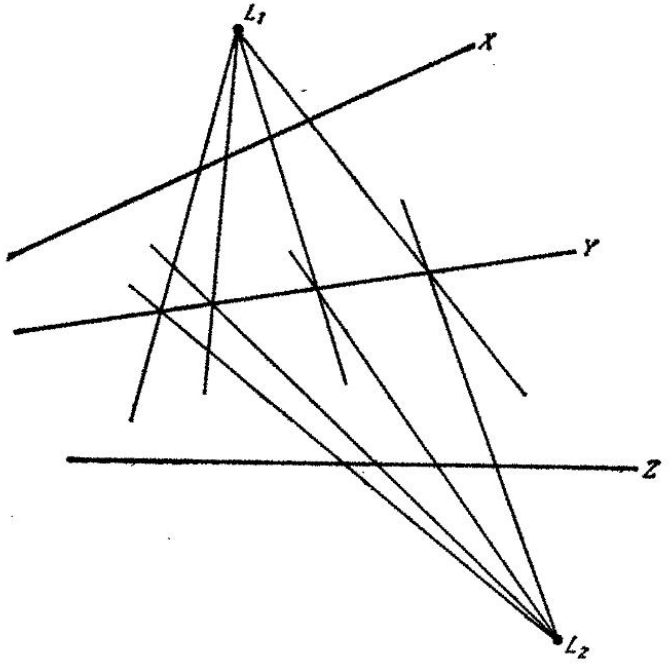


Рис. 11.3. Проективные и перспективные соответствия.

как и ряды Y и Z. Поэтому говорят, что два ряда X и Z находятся в *проективном соответствии* (или просто *проективны*). В общем случае два ряда проективны, если они связаны цепью перспективных соответствий. В проективной геометрии есть интересная теорема о том, что любые два проективных ряда могут быть связаны цепью по крайней мере из двух перспективных соответствий. Другими словами, для любых двух проективных рядов существует третий, находящийся в перспективном соответствии с обоими. Следовательно, два проективных ряда всегда могут быть изображениями одного и того же (одномерного) объекта. В терминах рис. 11. 3, если нам даны два изображения, состоящие из рядов X и Z, необходимое условие того, что они показывают один и тот же объект, сводится к тому,

что X и Z должны быть в проективном соответствии. Сложное отношение представляет собой количественную меру проективности двух различных рядов и поэтому приводит к решению задачи второго ракурса для случая одномерных объектов и изображений.

Рассмотрим теперь рис. 11.4, на котором показаны два перспективных ряда X и Y, пересекающих пучок из четырех линий. Примем X и Y за оси косоугольной декартовой системы координат. Обозначим через (a, b) координаты центра пучка в этой системе, через $(x_i, 0)$, $i=1, \ldots, 4$, координаты ряда точек на оси X и через $(0,$

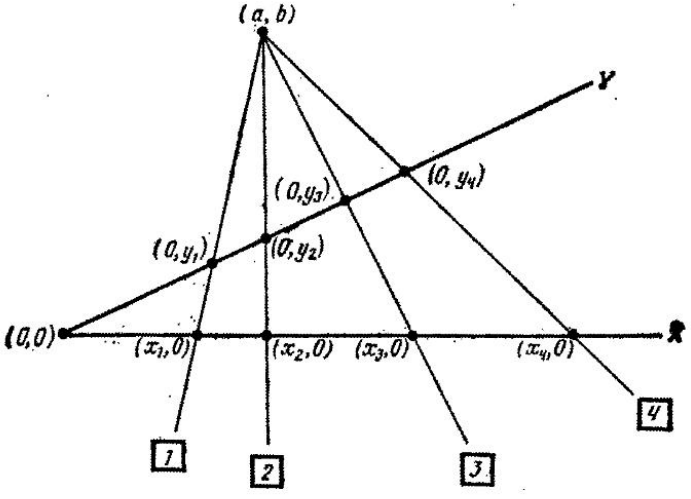


Рис. 11.4. К выводу сложного отношения.

$y_i)$, $i=1, \ldots, 4$, координаты ряда точек на оси Y. Нетрудно убедиться, что для i-й линии пучка должно выполняться условие

$$\frac{a}{x_i}+\frac{b}{y_i}=1, \quad i=1, \ldots, 4.$$

Вычитая соответствующие уравнения для j-й и i-й линий, получим

$$a\left(\frac{x_j-x_i}{x_i x_j}\right)=-b\left(\frac{y_j-y_i}{y_j y_i}\right), \quad i, j=1, \ldots, 4 \text{ и } i \neq j.$$

Обозначим временно это уравнение через «j, i». Разделив произведение уравнений «3,1» и «2,4» на произведение уравнений «2, 1» и «3, 4», получим

$$\frac{(x_3-x_1)(x_2-x_4)}{(x_2-x_1)(x_3-x_4)}=\frac{(y_3-y_1)(y_2-y_4)}{(y_2-y_1)(y_3-y_4)}. \tag{1}$$

Каждая из двух частей уравнения (1) называется *сложным отношением* перспективных рядов из четырех точек и обозначается (для

левой части) через $CR(x_1, x_2, x_3, x_4)$. Заметим, что сложное отношение не зависит от координат (a, b) центра пучка. Следовательно, уравнение (1) показывает, что любые два сечения пучка из четырех линий имеют одно и то же сложное отношение. Определим тогда естественным образом сложное отношение пучка из четырех линий как сложное отношение любого из его сечений. Уравнение (1) устанавливает также результат для двух пучков: если они имеют общий ряд, они должны иметь тогда одинаковое сложное отношение. Следовательно, если мы продвигаемся по цепи последова-

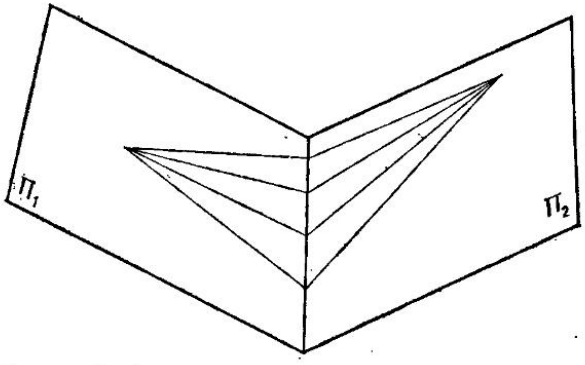


Рис. 11.5. Два пучка, лежащие в разных плоскостях.

тельных перспективных соответствий от одного ряда к другому, сложное отношение не изменяется. Поэтому сложное отношение является *проективным признаком*, или *проективным инвариантом*,— оно не изменяется при центральном проектировании. Иначе говоря, два ряда проективны тогда и только тогда, когда они имеют одинаковое сложное отношение. На рис. 11.3 ряды X и Z имеют одинаковое сложное отношение, а именно сложное отношение ряда Y, который является общим для обоих пучков. Мы пришли поэтому к одномерному варианту решения задачи второго ракурса: необходимое условие того, что два (одномерных) изображения показывают один и тот же объект, состоит в том, что любые два множества, составленные из четырех соответственных точек изображений, должны иметь одинаковое сложное отношение [1]).

Сделаем еще несколько замечаний, прежде чем оставить в покое сложное отношение. Во-первых, поскольку сложное отношение зависит только от разностей, оно независимо от начала координат. Поэтому, чтобы вычислить сложное отношение пучка, нет необходимости строить конструкцию, подобную показанной на рис. 11. 4. Во-вторых, два пучка, лежащие в разных плоскостях, могут иметь одинаковое сложное отношение; например, на рис. 11. 5 два пучка

[1]) Мы, конечно, игнорируем здесь проблему шума.

имеют общий ряд на пересечении двух плоскостей и, таким образом, имеют одинаковое сложное отношение. И наконец, мы видим, что имеется несколько возможных определений сложного отношения, зависящих от порядка, в котором помечены точки. Если поменять местами метки четырех точек ряда, получится другое сложное отношение. Можно показать, что из 24 различных возможностей разметки только шесть дают отличные от других определения сложного отношения. (Довольно интересно то, что эта шестерка образует группу по отношению к некоторой подходящей композиционной операции.) В данной главе мы примем в качестве стандарта сложное отношение, задаваемое каждой из частей уравнения (1), и подчеркнем, что разметка точек должна выполняться так, чтобы сохранить его постоянство.

11.3. ДВУМЕРНЫЕ ПРОЕКТИВНЫЕ КООРДИНАТЫ

В последнем разделе мы убедились, что сложное отношение является одномерным проективным инвариантом. В данном разделе мы построим сложное отношение для плоскости с тем, чтобы иметь дело со случаем двумерных объектов и двумерных изображений. Конечно, нас в конце концов будет интересовать общий случай трехмерных объектов и двумерных изображений. Однако этот общий случай связан с дополнительными трудностями; рассматриваемый же случай является наиболее сложной ситуацией, для которой имеется решение, не связанное ни с дополнительными ограничениями, ни с чересчур сложными вычислениями. Это связано с инвариантностью двумерных проективных координат, которые мы сейчас определим.

Пусть, как показано на рис. 11.6, нам даны четыре точки A, B, C, U, лежащие в одной плоскости, и пусть никакие три из них не лежат на одной прямой. Мы можем взять эти четыре точки в качестве *базы* двумерной проективной координатной системы; треугольник ABC называется *опорным треугольником*, а точка U по причинам, которые вскоре прояснятся, называется *единичной точкой*. Пусть на той же плоскости дана новая точка P (не обязательно внутри опорного треугольника); тогда мы определим ее *проективную координату* по оси AC как величину $CR\ (A, X, Y, C)$, т. е. как сложное отношение четырех перечисленных точек на оси AC. Поскольку [1])

$$CR(A, X, Y, C)=\frac{|Y-A|\cdot|X-C|}{|X-A|\cdot|Y-C|},$$

мы сразу же видим, что, если точка P лежит на отрезке AB, ее проективная координата равна нулю; если P лежит на BU, ее проективная координата равна единице; если P лежит на BC, ее проектив-

[1]) В соответствии с уравнением (1) мы будем использовать запись $|Y-A|$, чтобы обозначать взятое со знаком расстояние между A и Y.

ная координата равна бесконечности. Проективные координаты точки P по осям AB и BC определяются подобным же образом: путем проведения линий из противоположной вершины через точки U и P. Таким образом, проективные координаты точки P определены, если даны четыре опорные точки. Наоборот, допустим, нам дана проективная координата точки P, скажем, по оси AC. Поскольку точки A, X и C фиксированы, положение точки Y также фиксировано. Следовательно, мы знаем, что сама точка P должна быть разме-

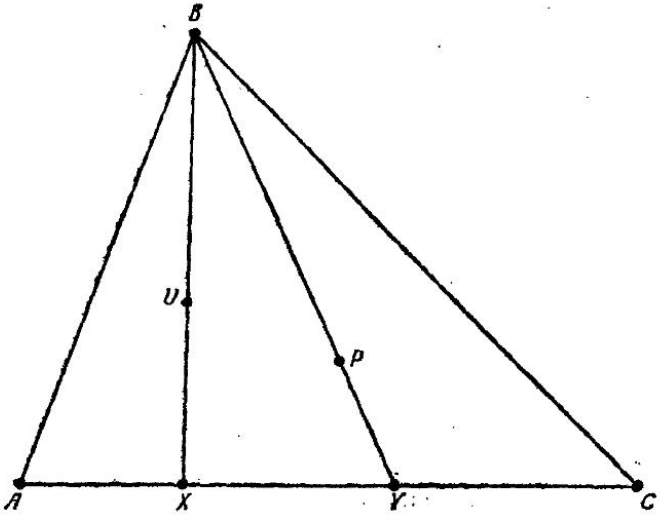


Рис. 11.6. Двумерные проективные координаты.

щена где-то на линии BY. Ее точное положение фиксировано, если мы знаем любую из двух оставшихся проективных координат, поскольку любая из них задает линию, пересечение которой с BY определяет P. Тогда в типичном случае двух любых проективных координат точки из трех достаточно, чтобы задать точку единственным образом. Единственное исключение имеет место, если точка P лежит на стороне опорного треугольника. В этом случае должна использоваться проективная координата точки по этой оси.

Теперь мы хотим показать, что проективная координата лежащей на плоскости точки P (взятая относительно некоторой базы) инвариантна по отношению к центральному проектированию. Общий случай показан на рис. 11.7, где мы можем считать ABC плоскостью объекта, L произвольным центром объектива, а $A'B'C'$ произвольной плоскостью изображения. Наш метод будет состоять в том, чтобы показать, что проективные координаты точки P' относительно базы A', B', C', U' равны проективным координатам точки P относительно базы A, B, C, U. Если мы это выполним, то

результат будет достигнут, поскольку мы покажем тем самым, чт проективные координаты точки P в каждой из проекций равны проективным координатам этой точки в исходной плоскости объекта. Мы начнем с наблюдения, что проективная координата точки

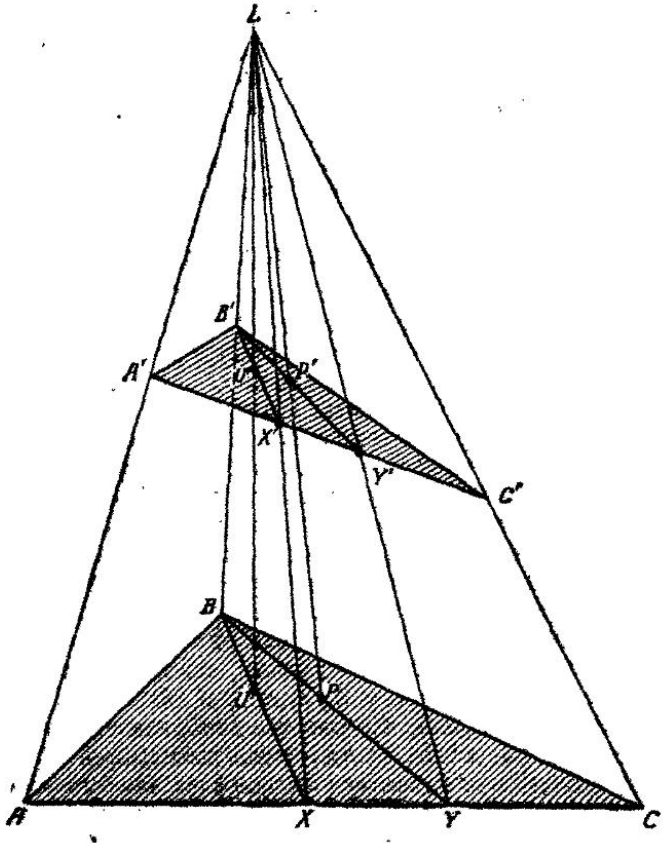


Рис. 11.7. Демонстрация инвариантности проективных координат.

P по оси AC равна $CR(A, X, Y, C)$. Затем, направив наше внимание на плоскость ALC, заметим, что $CR(A, X, Y, C)=CR(A', X', Y', C')$, поскольку оба ряда являются сечениями одного и того же пучка с центром в L. Но величина $CR(A', X', Y', C')$ по определению является проективной координатой точки P' относительно базы A', B', C', U' в плоскости изображения. Такие же аргументы справедливы для двух других осей, и поэтому мы показали, что проективные координаты точки P, лежащей в плоскости объекта, относительно произвольной базы равны проективным координатам изоб-

ражения точки P относительно изображения этой базы [1]). Таким образом, проективные координаты оправдывают свое название; они в самом деле инвариантны по отношению к центральному проектированию.

Приведенные рассуждения создают основу для решения двумерной задачи второго ракурса. Полагая, что плоскость объекта содержит по крайней мере пять характерных точек, мы берем любые четыре точки в качестве базы проективной координатной системы и вычисляем координаты оставшихся точек относительно этой базы. Необходимое условие того, что на двух изображениях показан один и тот же объект, сводится просто к требованию, чтобы соответственные точки имели одинаковые проективные координаты.

11.4. ЛИНИЯ, СОЕДИНЯЮЩАЯ ОБЪЕКТИВЫ

В предыдущем разделе мы показали, что для случая двумерных объектов проективные координаты действительно являются проективными инвариантами; было продемонстрировано, что проективные координаты каждого изображения объекта равны проективным координатам самого объекта. На практике мы обычно можем использовать и менее элегантные результаты. Так, например, часто имеются два изображения, и нужно просто решить задачу второго ракурса относительно этих двух конкретных картинок. Поэтому для нас нет необходимости искать признаки, которые были бы общими одновременно для всех возможных изображений, а вполне достаточно общих признаков этих двух изображений. Мы будем называть такие признаки *квазипроективными* и посвятим им наше внимание до конца этой главы. Чтобы прояснить различие между проективными и квазипроективными признаками, предположим, что у нас есть три изображения, скажем A, B и C, и мы хотим определить, возможен ли такой случай, что они все отображают один и тот же объект. Если бы мы могли использовать настоящий проективный признак, подобный проективным координатам, мы бы просто вычислили этот признак для всех трех изображений и сравнили соответствующие числа. С другой стороны, если бы мы должны были использовать квазипроективный признак, нам следовало бы вычислить значение этого признака для пар изображений и проверить, например, показывают ли A и B один и тот же объект и точно так же показывают ли B и C один и тот же объект. Взамен такой потери элегантности мы получаем существенную выгоду; у нас появляется

[1]) Для строгости мы должны были бы показать, что чертеж рис. 11.7 правилен, особенно то, что линии, которые показаны прямыми, и в самом деле прямые. Нам следовало бы показать, например, что точка X', определяемая как изображение точки X, совпадает с точкой X', определяемой как пересечение линии $B'U'$ с линией $A'B'$. Справедливость этого утверждения следует из того факта, что проективное преобразование превращает прямые линии в прямые же; дальнейшие подробности доказательства мы оставляем читателю.

возможность описывать квазипроективные методы, которые либо совсем не связаны со специальными ограничениями (такими, как двумерность объектов), либо в худшем случае связаны с достаточно слабыми ограничениями.

Первый квазипроективный признак, который мы хотим обсудить, основан на важном свойстве линии, соединяющей центры объективов двух заданных камер. Чертеж для общего случая показан на

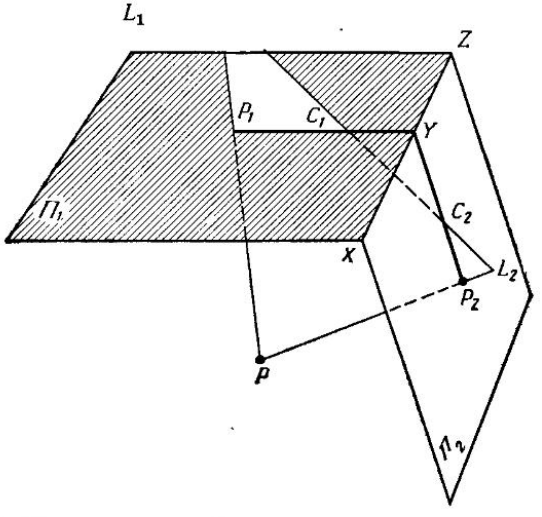


Рис. 11.8. Исследование свойств соединяющей объективы линии.

рис. 11.8, где L_1 и L_2 — центры объективов двух камер, Π_1 и Π_2— соответствующие им плоскости изображений, а P_1 и P_2— соответствующие изображения произвольной точки объекта P, лежащей где-то в трехмерном пространстве. Как видно на рисунке, буквами C_1 и C_2 обозначены точки, где соединяющая объективы линия прокалывает соответствующие плоскости изображений. Для простоты мы будем считать, что плоскости изображений не параллельны. Мы утверждаем, что линия P_1C_1 пересекает линию P_2C_2 где-то на XZ — линии пересечения двух плоскостей изображений. Чтобы убедиться в этом, обратим внимание на треугольную плоскость PL_1L_2. Ясно, что отрезок P_1C_1 лежит в этой плоскости, так же как и P_2C_2; следовательно, эти прямые либо пересекаются, либо параллельны. Кроме того, отрезки P_1C_1 и P_2C_2 лежат также в соответствующих им плоскостях изображений. Если эти плоскости изображений параллельны, то параллельны и прямые; поскольку мы приняли обратное, линии пересекаются и, более того, пересекаются где-то на линии пересечения плоскостей изображений. Итак, мы показали, что точки прокола соединяющей объективы линии обладают специаль-

ным свойством: прямые, проведенные от соответственных точек изображений через соответствующие точки прокола, пересекаются на линии пересечения плоскостей изображений.

Рассмотрим теперь ситуацию, в которой у нас есть четыре точки объекта: P, Q, R и S, и соответствующие им изображения P_i, Q_i, R_i и S_i, $i=1,2$. Мы можем снова построить точки C_1 и C_2, где соединяющая объективы линия прокалывает плоскости изображений.

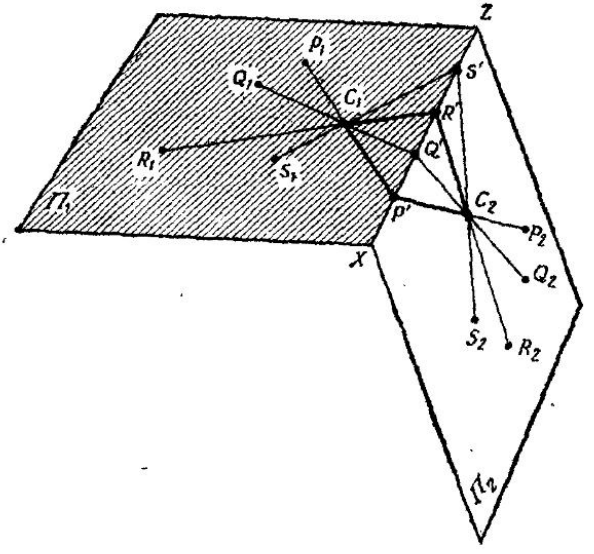


Рис. 11.9. Два пучка с общим рядом точек.

Такой случай показан на рис. 11.9, где мы для ясности исключили точки объекта, центры объективов и соединяющую их линию. Как мы только что видели, прямые, проведенные от соответственных точек изображений через соответствующие точки прокола, должны пересекаться на линии XZ, как показано на рисунке. Таким образом, у нас есть два пучка C_1 и C_2 из четырех линий каждый, пересечением которых является общий ряд $P'Q'R'S'$ из четырех точек. Следовательно, сложные отношения этих двух пучков должны быть равными. Тогда мы получим важный квазипроективный признак: если даны два изображения одного и того же объекта, то в каждом существует точка, а именно точка прокола соединяющей объективы линией, такая, что сложные отношения соответственных пучков с центрами в этих точках равны. (Хотя мы этого не доказывали, данный квазипроективный признак имеет место и тогда, когда две плоскости изображений параллельны. Однако, если соединяющая объективы линия параллельна какой-либо из плоскостей изображений (или обеим сразу), точка прокола (или точки) уходит в бесконеч-

ность, и метод теряет привлекательность по чисто вычислительным соображениям.) Заметим, кстати, что квазипроективная природа этого признака существенно связана с его происхождением, поскольку мы используем соединяющую объективы линию, определяемую двумя камерами.

Рассмотрим кратко, как можно использовать на практике признак, основанный на соединяющей объективы линии. Примем сначала, что нам известны относительные положения двух камер в момент съемки соответствующих изображений. В этом случае можно прямо вычислить точки прокола соединяющей объективы линии и на этой основе подсчитать сложные отношения, определяемые множествами из четырех соответственных точек изображений. В то же время, однако, если относительные положения камер известны, мы можем выполнить обычный стереоскопический расчет и проверить, пересекаются ли лучи, проходящие от объективов через соответственные точки изображений. С другой стороны, предположим, что относительные положения камер заранее не известны. Тогда мы можем, по крайней мере в принципе, организовать поиск на каждой плоскости изображения с целью найти такие точки C_1 и C_2, чтобы соответственные пучки линий с центрами в этих точках имели одинаково сложное отношение. Если такие точки можно найти, необходимое условие того, что два изображения показывают один и тот же объект, выполнено; в противном случае оно не выполнено. Заметим, однако, что, если мы организуем поиск, в нашем распоряжении должно быть больше четырех точек изображения на одну картинку. Очевидно, что поиск фактически выполняется в четырехмерном пространстве, поскольку у каждой из двух отыскиваемых точек прокола имеются две координаты. Таким образом, у нас должна быть возможность образовать по крайней мере четыре независимых сложных отношения для каждой картинки с тем, чтобы избежать вырожденных решений.

Ради определенности будем рассматривать задачу второго ракурса, используя описанный выше метод, как задачу поиска в четырехмерном пространстве. Примем для начала, что у нас есть две картинки, на каждой из которых имеется n соответственных точек, скажем $P_i^1, \ldots, P_i^n$, $i=1, 2$. Для i-го изображения и для любого заданного центра пучка C_i мы всегда можем построить $n-3$ независимых пучков по четыре линии в каждом; нам только нужно убедиться в том, что каждое подмножество из четырех точек изображения, определяющее данный пучок, содержит по крайней мере одну точку изображения, не входящую ни в какое другое подмножество. Таким образом, мы всегда можем построить по крайней мере $n-3$ независимых сложных отношений. Обозначим $n-3$ сложных отношений i-й картинки через $R_i^1, \ldots, R_i^{n-3}$. Очевидно, что все сложные отношения i-й картинки являются функциями C_i— вектора, координаты которого задают центр пучка. Тогда в идеальном случае, если два

изображения действительно показывают один и тот же объект, на каждом из них существует точка, скажем C_i^*, такая, что

$$R_1^j(C_1^*) = R_2^j(C_2^*)$$

для всех $j=1, \ldots, n-3$. На практике этот случай встречается редко. Вместо этого мы ожидаем, что соответственные сложные отношения будут равны лишь приближенно. В связи с этим мы можем свести задачу поиска к минимизации формы такого вида:

$$J(C_1^*, C_2^*) = \min_{C_1, C_2} \sum_{j=1}^{n-3} \| R_1^j(C_1) - R_2^j(C_2) \|.$$

Если найдены, скажем, посредством поиска по градиенту такие значения C_1^* и C_2^*, при которых величина суммы становится приемлемо малой, то мы решаем, что необходимые условия того, что два изображения показывают один и тот же объект, выполняются; в противном случае это не так. Таким образом, задача второго ракурса преобразована в задачу минимизации по градиенту, за которой следует процесс принятия решения.

11.5. АППРОКСИМАЦИЯ ОРТОГОНАЛЬНЫМ ПРОЕКТИРОВАНИЕМ

Особенно простые квазипроективные инварианты могут быть выведены, если допустить, что процесс съемки изображения моделируется не центральным, а ортогональным проектированием. Ортогональное проектирование, как показывает само название, подразумевает формирование точек изображения путем проектирования точек объекта ортогонально на плоскость изображения. Если имеется несколько точек объекта, их проектирующие лучи образуют параллельную связку линий; на этой параллельности и основан описываемый ниже метод. Заметим, кстати, что, если расстояние от центра объектива до множества точек объекта велико по сравнению с расстоянием между парами точек объекта, проектирующие лучи будут приблизительно параллельны. Следовательно, метод представляет практический интерес, поскольку камеры часто помещают относительно далеко от объектов, чтобы избежать сильных перспективных искажений. (Например, фотографы-портретисты обычно помещают свои камеры по крайней мере на расстоянии 2,5 м от снимаемого лица, чтобы на получающихся изображениях не увеличивались размеры носа.)

Геометрический чертеж ортогональной аппроксимации показан на рис. 11.10. Мы воспроизвели две плоскости изображений π_1 и π_2, объект в виде отрезка PQ и два изображения этого отрезка P_1Q_1 и P_2Q_2, лежащие на соответствующих плоскостях изображений. Центры объективов двух камер не показаны, и можно считать, что они находятся в бесконечности на пересечении соответствующих пар

проектирующих лучей. Важную роль в данном методе играет XZ— линия пересечения двух плоскостей изображения. В частности, мы утверждаем, что составляющие отрезков PQ, P_1Q_1 и P_2Q_2 в направлении XZ имеют все одну и ту же длину. Если это утверждение справедливо, длина составляющих соответственных отрезков изображения в направлении XZ является проективным инвариантом; эти составляющие равны на двух изображениях одного и того же отрезка.

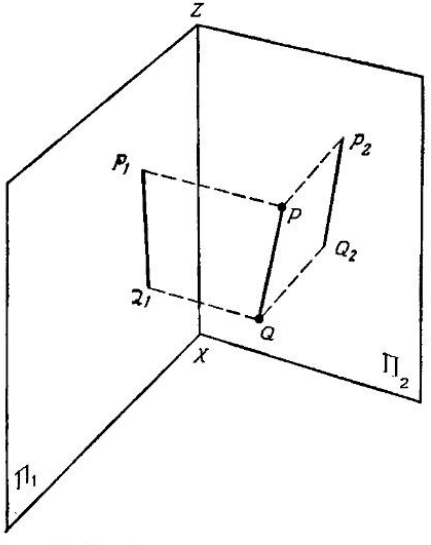


Рис. 11.10. Исследование ортогональной аппроксимации.

Набросаем схему доказательства выдвинутого выше утверждения, хотя оно и так довольно очевидно. Доказательство основано на двух свойствах ортогонального проектирования: во-первых, ортогональное проектирование является линейным преобразованием и, во-вторых, ортогональная проекция любого отрезка, параллельного плоскости изображения, имеет ту же длину, что и сам отрезок. Чтобы использовать свойство линейности, представим себе, что отрезок PQ является суммой двух составляющих, одна из которых совпадает по направлению с XZ. Вследствие линейности ортогональная проекция суммы (скажем, на первую плоскость изображения) равна сумме ортогональных проекций. Следовательно, отрезок P_1Q_1 представляет собой сумму двух векторов, один из которых есть проекция составляющей отрезка PQ в направлении XZ. Но, согласно второму свойству, составляющая PQ в направлении XZ не изменяется по длине при ортогональном проектировании; поэтому длины составляющих в направлении XZ для отрезка-изображения и отрезка-объекта одинаковы. Поскольку все сказанное справедливо и для второй плоскости изображения, может быть построено полное доказательство.

Когда дело доходит до практического применения этого квазипроективного признака, мы обнаруживаем, что применимы доводы, весьма похожие на те, которые использовались в предыдущем разделе. Как и раньше, если относительные положения двух камер известны, легко рассчитать проекции всех отрезков изображения на XZ; но, конечно, если относительные положения камер известны, имеются и лучшие пути решения задачи второго ракурса. Когда

относительные положения камер неизвестны, мы, как и прежде, для решения задачи второго ракурса можем использовать поисковые методы. Рис. 11.11 подсказывает, как можно сформулировать задачу поиска. На этом рисунке мы показали плоскости изображений рис. 11.10, развернутые относительно линии XZ так, что оба изображения оказываются в одной плоскости. Поскольку составляющие в направлении XZ для изображений обоих отрезков равны, отрезки P_1P_2 и Q_1Q_2 параллельны. Таким образом, если у нас есть две картинки одного и того же объекта, их можно поместнть на плоскость в такой относительной ориентации, чтобы линии, соединяющие соответственные точки изображений, были параллельны. Дру-

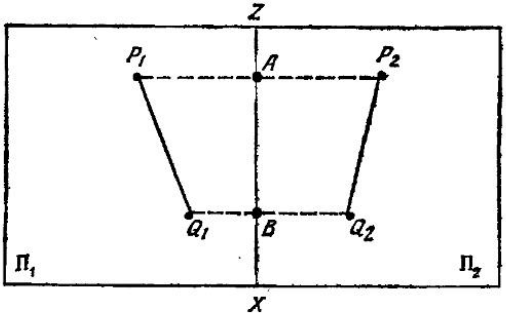


Рис. 11.11. Плоскости изображений рис. 11.10, развернутые относительно прямой XZ.

гой вариант основан на том, что должны быть, очевидно, некоторые предпочтительные направления на каждой плоскости изображения, такие, что составляющие соответственных отрезков изображения, измеренные по этим направлениям, оказываются равными. В любом случае простое рассуждение показывает, что здесь задача поиска двумерная, причем обе координаты поискового пространства представляют собой углы поворотов. Тогда на практике можно было бы отыскивать такую относительную ориентацию изображений, при которой критерий параллельности наиболее близок к выполнению (или, в другом варианте, такие предпочтительные направления, при которых наиболее близок к выполнению критерий равенства составляющих). В любом случае необходимо иметь по крайней мере три точки изображения, чтобы избежать вырожденных решений. Наконец, здесь осталась бы еще проблема решения, выполняется ли критерий настолько хорошо, чтобы можно было сделать решительный вывод, что это частное необходимое условие «одинаковости» двух изображений удовлетворено. Таким образом, как и в предыдущем разделе, задача второго ракурса превращена в задачу поиска, за которой следует процесс принятия решения.

Перечислив так подробно черты сходства между этим методом и описанным ранее, было бы правильно указать некоторые их важные различия. В предыдущем случае поиск выполнялся в четырехмерном поисковом пространстве. Более того, пространство поиска было не ограничено, поскольку физически мы отыскивали точки прокола, которые могли находиться в любом месте каждой из бесконечных плоскостей изображения. С другой стороны, настоящий метод связан с поиском во всего лишь двумерном ограниченном поисковом пространстве — ограниченном, поскольку физически мы отыскиваем ориентации, которые могут находиться только между 0 и 360°. Поэтому настоящий метод обладает тем преимуществом, что связанная с ним задача поиска существенно легче. Однако наряду с этим вычислительным преимуществом имеется и недостаток. Некоторое небольшое размышление приводит к выводу, что настоящий метод использует только одномерную информацию об объекте, а именно метод зависит исключительно от взятых по направлению XZ составляющих расстояний между парами точек объекта. Следовательно, хотя метод и в самом деле приводит к необходимому условию того, что два изображения показывают один и тот же объект, это условие слабее, чем то, которое может быть получено более сложным в вычислительном отношении методом.

11.6. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОБЪЕКТА

Мы несколько раз упоминали о том, что задача второго ракурса имеет прямое решение, когда относительные положения двух камер заранее известны. Решение связано с вычислениями, необходимыми для оценки стереоскопического триангуляционного уравнения. Возвращаясь обратно к предыдущей главе, мы видим из формул (34) и (35), что величина $J(a_0, b_0)$ представляет собой минимальное расстояние между лучами, проходящими через пару соответственных точек изображений. Таким образом, очевидное решение задачи второго ракурса (когда известны относительные положения камер) заключается в том, чтобы вычислить минимальное расстояние между членами каждой пары соответственных лучей и затем проверить, равны ли все эти расстояния нулю. Если это так, т. е. если лучи, проведенные через соответственные точки изображений, пересекаются, тогда необходимое условие того, что два изображения показывают один и тот же объект, будет выполнено. Более того, этот метод восстанавливает и сам трехмерный объект, если предположить, что действительно один и тот же объект показан на обеих картинках. Ясно, что объект определяется пересечениями соответственных лучей [1]).

[1]) На практике, конечно, мы не можем ожидать, что соответственные лучи пересекутся, даже если обе картинки показывают один и тот же объект. Вслед-

Предыдущий метод вполне очевидным образом может быть обобщен на случай неизвестных положений камер. Основная идея заключается в том, чтобы выполнить поиск по всем возможным позициям камер и найти такую пару положений, при которой наблюдаются пересечения соответственных проектирующих лучей. Если можно будет найти такие положения камер, необходимые условия того, что оба изображения показывают один и тот же объект, будут выполнены. Более того, если предположить, что оба изображения действительно показывают один и тот же объект, решение восстанавливает как сам трехмерный объект, так и относительные позиции камер.

Рассмотрим немного более подробно, как можно решить задачу поиска. Во-первых, очевидно, что важны только относительные положения двух камер; можно ничего не говорить об их абсолютных положениях. В этом случае мы можем с тем же успехом предположить, что позиция первой камеры фиксирована в некоторой глобальной системе координат; для удобства мы примем, что первая камера находится в начале координат и ее углы наклона и поворота равны нулю. Положение второй камеры относительно первой определяется тремя параметрами переноса и тремя параметрами вращения. Для простоты примем, что камеры никогда не поворачиваются вокруг своих собственных оптических осей, и поэтому справедливы общие формулы, использовавшиеся в предыдущей главе. При таком предположении позиция второй камеры определяется тремя параметрами поворота и только двумя углами. Далее, мы уже отмечали, что формулы (34) и (35) предыдущей главы дают минимальное расстояние между лучами, проходящими через пару соответственных точек изображений. Однако единичные векторы $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$, взятые в направлении проектирующих лучей, являются функциями как положений камер, так и координат точек изображений. Следовательно, для каждой пары соответственных точек изображений и для всех возможных (относительных) положений камер мы можем в принципе рассчитать, насколько близки к пересечению соответственные лучи. В принципе мы можем затем выполнить поиск в пространстве всех (относительных) положений камер, чтобы найти позиции, в которых соответственные лучи наиболее близки к пересечению. Если две картинки на самом деле показывают один и тот же объект, то существуют относительные положения камер, в которых соответственные лучи пересекаются, а именно это как раз те позиции, которые камеры занимали в момент съемки изображения. Таким образом, метод восстановления объекта вычисляет квазипроективный признак аналогично двум предыдущим методам.

ствие шума мы могли бы лишь ожидать, что минимальные расстояния между лучами будут малы, и в этом случае объект будет определен точками «почти пересечения» пар лучей.

Стоит обсудить здесь относительные достоинства этого метода по сравнению с двумя последними. В некотором смысле метод восстановления объекта является наиболее сильным из всех, которые мы рассматривали, поскольку он использует всю возможную информацию, содержащуюся в изображениях. Грубо говоря, при использовании метода восстановления объекта задается вопрос: существует ли такой объект, что две его проекции *суть* два данных изображения? В отличие от него при использовании двух предыдущих методов вопрос задается в такой форме: существует ли такой объект, что две его проекции имеют определенные общие с двумя данными изображениями признаки? Другими словами, предыдущие методы сравнивали функции от данных изображений, в то время как настоящий метод сравнивает сами изображения. С другой стороны, метод восстановления объекта связан с поиском в пространстве всех относительных положений камер. При наших предположениях это пятимерное пространство параметров, задаваемое тремя переменными вращения и двумя переменными переноса; поэтому поисковое пространство не только имеет высокую размерность, но и не ограничено по трем координатным осям. Поскольку трудность реализации любого квазипроективного метода зависит в основном от трудности связанной с ним задачи поиска, создается впечатление, что восстановление объекта в общем случае представляет для реализации наибольшую трудность по сравнению со всеми методами, которые мы обсуждали.

11.7. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Как мы уже упоминали во введении к этой главе, задача второго ракурса (в описанном здесь виде) привлекала весьма малое внимание исследователей, работавших в области анализа сцен. Отчасти это произошло потому, что сама задача имеет довольно специальный характер. В самом деле, причины, побудившие нас изложить различные методы, связаны больше с желанием добиться хорошего понимания свойств перспективных преобразований, чем с убежденностью в какой-то особой важности задачи второго ракурса. Другая причина такого недостатка внимания состоит в том, что методы, которые мы обсуждали, являются в определенном смысле «последним средством»; они применимы только тогда, когда сравниваемые изображения настолько похожи, что можно использовать технику какого-либо рода точных измерений. Усилия исследователей в молодой области анализа сцен направлены сейчас на анализ менее тонких (но достаточно сложных) различий. Во всяком случае нам известны только три работы, в которых рассматривается именно задача второго ракурса в том же виде, в каком она определена в данной главе. Все три появились в сборнике весьма глубоких русских статей под редакцией Кудрявцева (1967). Растригин (1967) разра-

ботал обсуждавшийся в разд. 11.5 метод, который основан на аппроксимации центрального проектирования ортогональным. Юранс (1967) развил метод, основанный на точках прокола соединяющей объективы линии, который описан в разд. 11.4. Применение проективных координат к двумерной задаче второго ракурса было описано Эльбуром (1967). Метод восстановления объекта был разработан независимо Бледсоу и Хартом [1]), а также Ходжесом [1]).

Поскольку проективные инварианты входят в предмет проективной геометрии, можно ожидать найти в стандартных руководствах такие проективные признаки, которые ведут к множеству решений задачи второго ракурса. В определенной степени это верно; двумерные проективные координаты являются элементарной темой и обсуждаются, например, Грауштейном (1963). Однако, как мы видели в разд. 11.3, двумерные проективные координаты применимы только в том случае, когда интересующие нас объекты сами двумерны. В общем, по-видимому, верно, что классическая проективная геометрия ограничила свое внимание проективными преобразованиями, отображающими одну точку в одну, т. е. преобразованиями, которые отображают одно d-мерное пространство в другое d-мерное пространство. В анализе же сцен мы, напротив, больше интересуемся преобразованиями, которые отображают трехмерное пространство в двумерное. Такое преобразование явно не переводит одну точку в одну, и в результате мы были вынуждены уделить больше внимания квазипроективным инвариантам, чем более элегантным настоящим проективным инвариантам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Грауштейн (Graustein W. C.)
Introduction to Higher Geometry, Macmillan, New York, 1963.

Кудрявцев В. Н., ред.
Вопросы кибернетики и право (сборник статей). «Наука», М., 1967.

Растригин Л. А.
Об идентификации плоских изображений пространственных объектов. В сб. «Вопросы кибернетики и право», «Наука», М., 1967, стр. 298—304.

Эльбур Р. Э.
Использование аппарата проективной геометрии в процессе идентификации личности по фотоснимкам. В сб. «Вопросы кибернетики и право», «Наука», М., 1967, стр. 267—287.

Юранс В.
Некоторые вопросы теории идентификации объектов с использованием аппарата проективной геометрии. В сб. «Вопросы кибернетики и право», «Наука», М., 1967, стр. 288—297.

Задачи

1. а) Покажите, что из 24 возможных сложных отношений для четырех точек различимы только шесть.
   б) Покажите, что шесть различимых сложных отношений для четырех точек образуют группу относительно операции композиции функций.

[1]) Неопубликованное сообщение.

2. Пусть дан пучок P из четырех лежащих в одной плоскости линий, и пусть имеются четыре вектора $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_4$, которые начинаются в центре пучка и направлены по его линиям. Пусть $\mathbf{v}_i^*$ — вектор, ортогональный $\mathbf{v}_i$ и полученный, как обычно, путем обмена компонент $\mathbf{v}_i$ и замены знака у первой компоненты. Покажите, что сложное отношение пучка определяется формулой

$$\frac{(\mathbf{v}_1^* \cdot \mathbf{v}_2)(\mathbf{v}_3^* \cdot \mathbf{v}_4)}{(\mathbf{v}_1^* \cdot \mathbf{v}_4)(\mathbf{v}_3^* \cdot \mathbf{v}_2)}.$$

(Указание: найдите сложное отношение пучка, подсчитав сначала сложное отношение сечения, параллельного четвертой линии пучка.)

3. Опираясь на рис. 11.6, определите подмножества бесконечной линии AC, для которых проективные координаты точки P по оси AC заключены

а) между 0 и 1;
б) между 1 и ∞;
в) между $-\infty$ и $-\left\| \frac{|X-C|}{|X-A|} \right\|$;
г) между $-\left\| \frac{|X-C|}{|X-A|} \right\|$ и 0.

4. Разработайте простую процедуру поиска по градиенту для отыскания локального минимума произвольной функции.

5. Запишите в виде формул задачу градиентного поиска, связанную с квазиинвариантом, который основан на аппроксимации перспективного преобразования ортогональным. Предположите теперь, что относительный масштаб двух данных изображений неизвестен. Например, одно изображение без вашего ведома может быть увеличено. Введите в формулы задачи поиска масштабный коэффициент и найдите аналитически его минимизирующее значение.

6. Запишите в виде формул задачу поиска, связанную с методом восстановления объекта. Разработайте план эксперимента на вычислительной машине для исследования вопроса, имеет ли минимизируемая форма много или мало относительных минимумов.

Глава 12

МЕТОДЫ СОСТАВЛЕНИЯ И ОБРАБОТКИ ОПИСАНИЙ В АНАЛИЗЕ СЦЕН

12.1. ВВЕДЕНИЕ

До сих пор в ч. II этой книги мы обсуждали многочисленные методы извлечения из картинок различных видов информации. Теперь мы обратим наше внимание на семейство методов, в которых эта информация используется для описания в том или ином смысле целых сцен.

Как мог бы читатель вспомнить из нашего более раннего обсуждения задачи описания объекта, интерпретировать понятие «описание» можно многими способами. В традиционных задачах опознавания образов описание сцены понимается как ее отнесение к одному из некоторого заранее заданного числа классов. Хотя такая точка зрения полезна во многих практических ситуациях, существуют другие важные и интересные виды задач, в которых она не является естественной. При решении задач из этих областей нас интересует скорее логически стройное описание, объяснение структуры сцены, чем ее классификация. Для задач такого рода сами по себе методы классификации, описанные в ч. I, оказываются неадекватными, и должны применяться другие методы, имеющие дело непосредственно со структурными отношениями.

Все методы, обсуждаемые в этой главе, основаны на двух предположениях. Во-первых, мы считаем, что о сцене уже получена определенная информация в виде каких-то блоков и она записана символическим образом. Например, мы можем извлечь информацию о линиях и формах на изображении, используя некоторые из методов, описанных в предыдущих главах. Во-вторых, мы считаем, что имеется некоторая априорная информация о структуре сцен того класса, который должен анализироваться. Например, мы можем знать заранее, что все сцены изображают объекты только типа многогранников. Таким образом, общая задача обсуждаемых методов состоит в том, чтобы объединять предварительные знания о классе сцен с конкретной символической информацией о данной сцене для получения в каком-то виде описания структуры данной сцены. Мы здесь отметим, что развитие этих методов переживает пока период младенчества; тем не менее в последующем изложении представлены методы, обладающие некоторой общностью и потребовавшие большой изобретательности.

12.2. ФОРМАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОПИСАНИЙ

Мы начнем наше обсуждение методов составления и обработки описаний, рассмотрев несколько формальных систем, в рамках которых описания могут порождаться и записываться. Эти системы можно считать общей основой, которая не привязана ни к какому конкретному классу сцен или видов обстановки. Позднее мы будем обсуждать несколько методов, основанных на более точных предположениях о том наблюдаемом мире, который анализируется.

12.2.1. СИНТАКСИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ

В качестве введения в тему рассмотрим элементарный пример. На рис. 12.1 показана простая сцена, изображающая коробку и цилиндр. На очень грубом уровне описания сцена может быть охарактеризована просто как «коробка и цилиндр». Поскольку нас

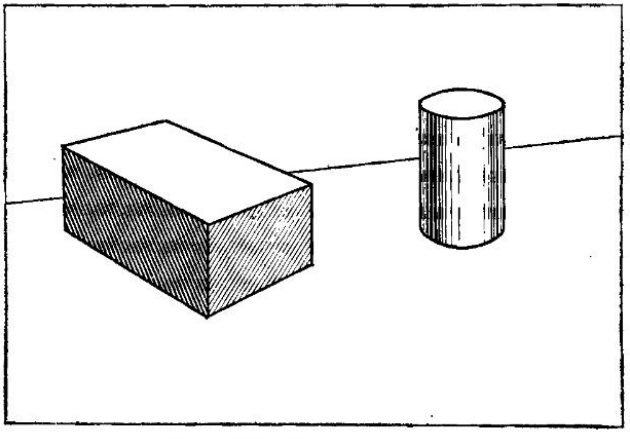


Рис. 12.1. Простая сцена.

интересует структура сцены, мы можем развить немного этот начальный вариант и описать сцену как «коробку слева от цилиндра». Продолжая уточнять описания, можно в свою очередь охарактеризовать коробку как соединение трех четырехугольников и т. д. до любого желаемого уровня детальности.

Этот процесс последовательного уточнения структурного описания сцены носит заметное сходство с процессом получения структурного описания английского предложения. В соответствии с этим естественно рассмотреть понятие *грамматики* как некоторой формальной системы, в рамках которой можно описывать изображение. Такая формальная система тщательно изучалась в связи с ее приложениями к языкам программирования и к задачам автома-

тического перевода с языка на язык; следовательно, *синтаксический подход* [1]) привлекателен как совокупность сложившихся теоретических методов, потенциально применимых к задачам анализа сцен. Мы начнем наше обсуждение синтаксических методов, ограничив свое внимание одномерными строками символов. Такие строки символов, конечно, представляют собой исходный материал обычного синтаксического анализа. Позднее мы рассмотрим способы, посредством которых идеи обычного анализа могут применяться на двумерной плоскости изображения.

Грамматика представляет собой формальную конструкцию, содержащую образования трех типов: *терминальные* или *первичные* символы, *нетерминальные* символы и *правила подстановок* или *порождающие правила*. Грамматика может использоваться либо в *порождающем*, либо в *анализирующем* режиме. Когда грамматика используется в порождающем режиме, она позволяет конструировать строки терминальных символов путем последовательного применения правил подстановок. Строка терминальных символов, построенная с помощью данной грамматики в порождающем режиме, называется *предложением*. Множество всех предложений, которые могут быть построены с помощью данной грамматики, называется *языком* этой грамматики.

Прежде чем рассматривать применение грамматики для анализа, проиллюстрируем эти абстрактные идеи на примере очень простой грамматики. Пусть дано множество терминальных символов $T=\{a, b\}$ и множество нетерминальных символов $N=\{S, B\}$. Символ S означает «предложение» (sentence) и, таким образом, отличается от других нетерминальных символов. Наша иллюстративная грамматика содержит следующие пять правил подстановок:

1. $S::=a.$
2. $S::=aS.$
3. $S::=aB.$
4. $B::=b.$
5. $B::=bS.$

Когда грамматика используется в порождающем режиме, символ «: :=» имеет смысл «заменить символ слева строкой символов справа». Применим грамматику для построения простого предложения. Начнем с того, что приравняем символ, обозначающий предложение, самому себе:

$$S=S.$$

Произвольно выбрав правило 2 и применив его к правой части равенства, получаем

$$S=aS.$$

[1]) В отечественной литературе применяется термин *лингвистический*, или *труктурный*, подход.— *Прим. перев.*

Применяя правило 2 еще раз, получаем

$$S=aaS.$$

Теперь, применив правило 3, получаем

$$S=aaaB.$$

Применяя правило 5, мы получаем

$$S=aaabS.$$

И наконец, применение правила 1 дает нам

$$S=aaaba,$$

и дальнейшие подстановки невозможны. Таким образом, если применять порождающие правила в последовательности 2, 2, 3, 5, 1 к исходному символу предложения S, порождается последовательность терминальных символов *aaaba*. Очевидно, что применение правил в другой последовательности даст другую последовательность символов.

Теперь обратимся к задаче использования грамматики для анализа строки первичных символов. Мы должны ответить на два вопроса: во-первых, является ли данная строка предложением языка, определяемого грамматикой, и, во-вторых, какова структура строки, если она является предложением? Процесс ответа на эти вопросы посредством использования грамматики в анализирующем режиме называется *грамматическим разбором*. Один из методов грамматического разбора строки, называемый разбором сверху вниз, основан на конструировании дерева всех возможных способов, посредством которых можно применять правила подстановок для построения стоящей на первом месте исходной строки. Если нельзя найти такую последовательность правил, строка не является предложением; если имеется единственная последовательность, то полный путь по дереву определяет структуру строки. Если имеется более чем одна последовательность правил, структура строки *синтаксически неоднозначна*.

Понять, что такое грамматический разбор, проще всего с помощью примера. Предположим поэтому, что мы разбираем построенную ранее строку *aaaba* (которая, конечно, является предложением). Основная идея заключается в том, чтобы просмотреть набор порождающих правил и проверить, какие из них применимы к исходной строке. Поскольку строка начинается с символа «*a*», применимы только первые три правила. Поэтому строка имеет форму либо «*a*», либо «*aS*», либо «*aB*». Очевидно, что строка не просто «*a*». Можно было бы для начала отнести ее к форме «*aB*», если бы мы не видели из правил, что все формы «*B*» должны начинаться с символа «*b*»; поэтому наша строка не может иметь форму «*aB*». Следовательно, строка должна иметь форму «*aS*», где теперь $S=aaba$. На рис. 12,2

этот повторяющийся процесс показан в виде *дерева грамматического разбора*. Цифры на ветвях дерева представляют собой номера правил. Узлы помечены крестом, если для них нет применимых правил подстановок. Заметим, что законченное дерево определяет последовательность правил подстановок 2, 2, 3, 5, 1, которая использовалась для порождения исходной строки. Более того, в этом примере

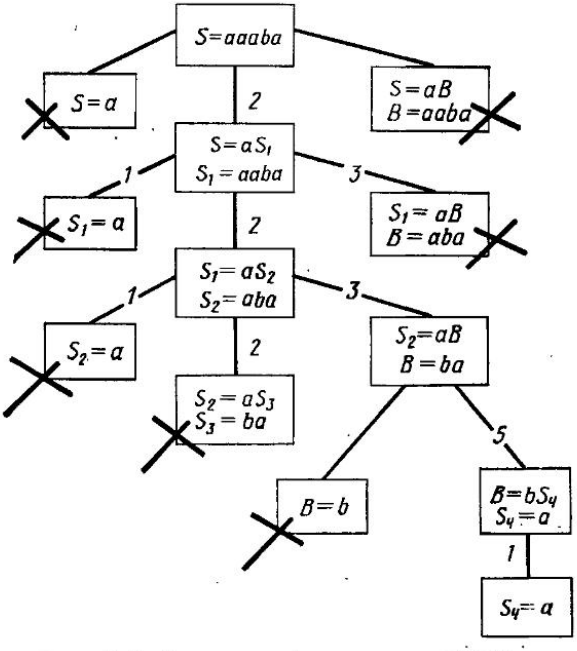


Рис. 12.2. Дерево грамматического разбора.

имеется только один путь через дерево; следовательно, предложение *aaaba* порождается грамматикой единственным образом.

Читатель, может быть, уже заметил, что легко дать характеристику языку нашей очень простой грамматики; он состоит из всех последовательностей символов «*a*» и «*b*», начинающихся с «*a*» и не содержащих нигде двух символов «*b*» подряд. В более общем случае не так легко охарактеризовать ни язык грамматики, ни грамматику, порождающую данное множество предложений. Эти вопросы и родственные им вопросы эффективности грамматического разбора и учета его неоднозначности относятся к области теории формальных языков. Как бы ни были интересны эти темы, мы воздержимся от их обсуждения и сосредоточимся на основной проблеме — применении синтаксических методов к двумерным сценам.

Основная теоретическая трудность, с которой приходится сталкиваться при распространении формального синтаксиса на двумер-

ный случай, проистекает из следующего фундаментального факта: одномерная линия упорядочена естественным образом, а двумерная плоскость — нет. Следовательно, естественный способ обработки одномерной строки символов заключается в замене одного символа за другим по цепочке. Никакой естественной аналогии для двумерного случая не существует. Чтобы сделать это различие более наглядным, рассмотрим снова простую сцену рис. 12.1. На рис. 12.3 показано одно возможное дерево грамматического разбора для этой сцены (не нуждающееся в объяснениях). Однако, даже если мы укажем точные описания для таких первичных элементов, как «поверх-

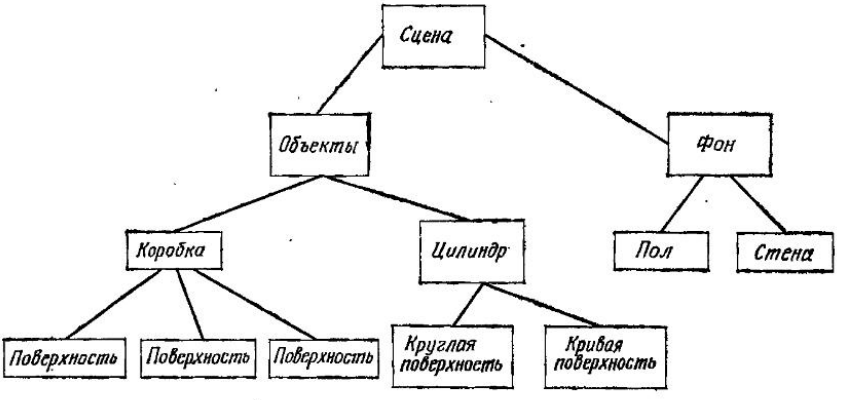


Рис. 12.3. Возможное дерево грамматического разбора для сцены рис. 12.1.

ность», это дерево будет описывать сцену только весьма смутно. Например, три поверхности можно соединить вместе различными способами, и только некоторые из них образуют коробки.

Проблему, поставленную отсутствием естественного упорядочения для плоскости, пытались решить различными путями. Может быть, наиболее прямой состоит в том, чтобы опираться только на границу объекта, пользуясь, таким образом, естественным упорядочением одномерного множества точек. В качестве тривиального примера такого подхода мы можем определить «четырехугольник» следующим образом:

$$\text{четырехугольник} ::= \text{линия} + \text{линия} + \text{линия} + \text{линия},$$

где знак «+» означает сцепление и подразумевается, что цепочка должна замкнуться на себя. В этом простом примере выбор первичных элементов (прямых линий) очевиден. Для объектов более общего вида, ограниченных, скажем, гладкими кривыми, выбор менее ясен. Даже после того, как мы задали некоторое множество первичных кривых, часто оказывается нелегко решить, где на границе объекта кончается один первичный элемент и начинается другой.

Эта проблема идентификации первичных элементов в сцене не является особенностью только подхода, основанного на описании границы: такого рода трудность характерна для всех синтаксических методов.

Подход, основанный на описании границы, имеет очевидные ограничения. Предположим, например, что мы хотим описать коробку на рис. 12.1, используя прямолинейные отрезки в качестве первичных элементов. Если считать, что четырехугольные поверхности (нетерминальные символы) уже описаны в терминах прямолинейных отрезков, то нам еще нужно задать отношения между тремя четырехугольниками. Один из способов, посредством которых это может быть сделано, состоит в том, чтобы задать «крюки» или точки притяжения на каждом четырехугольнике. Такой вариант показан на рис. 12.4, где для ясности мы изобразили четырехугольники в таком же виде, как и стороны коробки на рис. 12.1. Синтаксическое описание такой коробки может указывать с помощью подходящих обозначений, что «четырехугольник A, крюк 1, притягивает четырехугольник C, крюк 4», и т. д. для всех вершин.

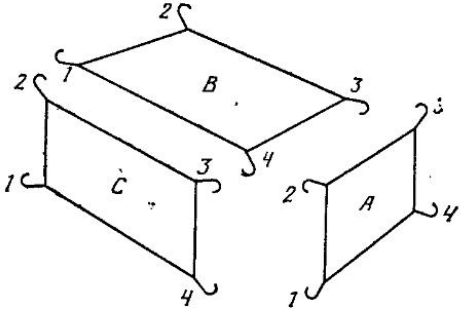


Рис. 12.4 Разделение коробки на четырехугольники.

Сходный метод задания отношений между первичными элементами основан на стандартных точках притяжения. Пусть мы заранее договорились, что каждый первичный элемент имеет две характерные точки — *голову* и *хвост*. Сцеплению двух терминальных символов придается смысл «сложения векторов», т. е. сцепления по принципу «голова с хвостом» первичных элементов изображения, связанных с терминальными символами [1]). Развивая эту мысль, примем, что каждая нетерминальная конструкция изображения также имеет голову и хвост. Ее хвост совпадает с хвостом начального первичного элемента в ее определении, а ее голова совпадает с головой последнего первичного элемента. Таким образом, если терминальные символы a, b и c представляют три первичных элемента изображения, то нетерминальная цепочка A, определяемая формулой $A=a+b+c$, будет иметь в качестве хвоста хвост элемента «a», а в качестве головы голову элемента «c», т. е. формальная система, имеющая дело со сцеплением (или с анализом) терминальных

[1]) Мы подразумеваем, что первичные элементы изображения могут подвергаться переносу на плоскости картинки, но не вращению.

символов, пригодна также и для нетерминальных. В качестве примера такого подхода предположим, что мы описываем цилиндр рис. 12.1 с помощью первичных элементов, показанных на рис. 12.5. Мы будем обозначать операцию сцепления головы с хвостом знаком «+», а символ «~» будет иметь смысл «поменять местами голову и хвост первичного элемента». Мы тогда запишем вполне очевидное,

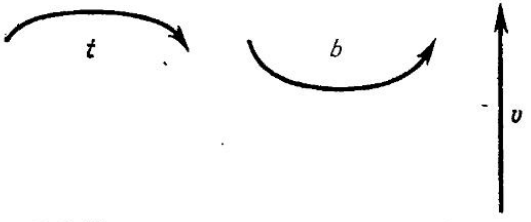


Рис. 12.5. Набор первичных элементов изображения.

хотя, конечно, не единственно возможное выражение:

$$\text{цилиндр} = \tilde{v} + b + v + \tilde{t} + b.$$

С помощью не нуждающихся в объяснении нетерминальных символов это предложение можно разобрать следующим образом:

$$\underbrace{\underbrace{\tilde{v} + b + v}_{\text{боковая поверхность}} + \underbrace{\tilde{t} + b}_{\text{крышка}}}_{\text{цилиндр}}.$$

Нам нет необходимости ограничивать себя только определенными выше операторами «+» и «~». Чтобы продемонстрировать еще одну возможность, определим операцию «$p*q$» как «соединение головы p с головой q и хвоста p с хвостом q». Пользуясь этим дополнительным оператором, мы можем описать изображение цилиндра, например, посредством следующих порождающих правил:

1. Цилиндр : :=Боковая поверхность*Крышка.
2. Боковая поверхность : :=$\tilde{v}+b+v$.
3. Крышка : :=$t*b$.

Используем этот пример для демонстрации того, как можно синтаксически анализировать изображение, чтобы обнаружить присутствие цилиндра. Важная деталь, которую следует подчеркнуть, состоит в том, что для анализа с помощью какой-либо грамматики необходимо наличие *распознавателей первичных элементов* — процессов или механизмов для обнаружения первичных элементов на картинке. В нашем примере независимо от выбора порождающих правил необходимы распознаватели для обнаружения вертикаль-

ных линий и двух видов кривых линий. Заметим также, что мы ничего не сказали о представлении анализируемой картинки; она может быть аналоговым изображением, градиентным изображением, контурным рисунком или может иметь какую-либо другую форму. Мы предполагаем, что распознаватели первичных элементов пригодны для работы с данной конкретной формой представления изображений.

Предположим теперь, что нам дана картинка и мы хотим узнать, содержит ли она цилиндр. Применяя процедуру грамматического разбора сверху вниз, мы узнаем из порождающих правил 1 и 2, что цилиндр должен содержать боковую поверхность и что боковая поверхность должна содержать вертикальную линию. Поэтому мы просматриваем картинку, чтобы определить расположение вертикальной линии. (Заметим, что, если бы мы разбирали одномерную строку символов, мы бы просто осмотрели первый элемент.) Найдя вертикальную линию, мы будем считать ее нижний конец головой, а ее верхний конец хвостом, поскольку нас скорее интересует «*v*», чем «*v*». Из порождающего правила 2 мы видим, что с головой вертикальной линии должен соединяться первичный элемент «*b*», и поэтому осматривается область вокруг нижнего конца вертикальной линии. Если элемент «*b*» не найден, мы должны снова поискать какую-то другую вертикальную линию. Предположим, что, напротив, элемент «*b*» найден. Как предписывает порождающее правило 2, окрестность конца кривой «*b*» осматривается с тем, чтобы определить положение второй вертикали. Если она найдена, мы можем заявить, что найдена боковая поверхность. Теперь внимание переключается на поиск крышки, соединенной с боковой поверхностью согласно предписанию порождающего правила 1. Если такая крышка и в самом деле найдена, процесс разбора успешно заканчивается; более того, мы имеем подробное описание, которое позволяет нам идентифицировать части изображения с определенными частями абстрактного «цилиндра».

Стоит отметить, что процесс разбора сверху вниз управляет применением распознавателей первичных элементов. Каждый распознаватель, кроме первого в нашем примере, не должен применяться ко всей сцене; вместо этого распознаватель анализирует только локальную область изображения. Это свойство *целенаправленности* грамматического разбора сверху вниз уменьшает не только вычислительную нагрузку на распознаватели первичных элементов, но также и вероятность неправильного обнаружения этих элементов.

Наше обсуждение синтаксических методов было кратким. Однако, прежде чем покончить с этой темой, можно сделать несколько общих замечаний. Одна из наиболее серьезных проблем, связанных с применением грамматики, уже упоминалась — это проблема обнаружения первичных элементов в сцене. Точное обнаружение первичных элементов оказывается весьма важным в связи с самой при-

родой процесса грамматического разбора, поскольку неверное распознавание единственного элемента может существенно изменить конечный результат. В качестве грубой аналогии мы можем вообразить себе трудность, с которой сталкивается, скажем, компилятор с ФОРТРАНА, если на его вход поступают неправильно считанные символы алфавита. Второе замечание касается применимости синтаксического анализа к различным классам изображений. Снова рассмотрим по аналогии использование грамматики в языках программирования. Одна из наиболее привлекательных сторон такого применения связана с рекурсивной природой грамматики. Правило подстановок может применяться произвольное число раз, и поэтому можно записать в очень компактной форме некоторые основные характеристики бесконечного числа предложений. В случае анализа сцен грамматика наиболее пригодна, если интересующая нас сцена построена из небольшого числа первичных элементов посредством рекурсивного применения небольшого числа правил подстановок. В тех случаях, когда это не так — когда нельзя применить всю силу рекурсии, — грамматика становится формальным способом исчерпывающего описания «на словах» всего содержания картинки, и преимущества компактности описания теряются. Таким образом, формальный синтаксический подход к описанию сцен связан с нетривиальными трудностями, как и некоторые другие уже существующие весьма мощные средства.

12.2.2. ГРАФЫ ОТНОШЕНИЙ

Во многих задачах анализа сцен нас интересует описание «на словах», т. е. символически, структуры конкретной сцены. Мы только что видели, что в таких ситуациях могут применяться формальные синтаксические методы; другим средством составления символических описаний являются *графы отношений*.

Вместо того чтобы открывать эту тему формальным определением, возьмемся за нее с помощью примера. На рис. 12.3 мы показали дерево грамматического разбора для сцены рис. 12.1. *Узлы* дерева помечены как части сцены; *дуги* дерева (дуги представляют собой соединения между узлами) не помечены. Хотя эти дуги не имеют точных меток, мы можем заметить, что вкладываемый в них смысл сводится к тому, что узел на нижнем конце дуги «является частью» узла на ее верхнем конце [1]). Другими словами, дуги дерева грамматического разбора задают определенное отношение между узлами, которые они связывают.

---

[1]) Более точно, мы должны сказать, что часть сцены, представленная узлом на нижнем конце дуги, «является частью» части сцены, представленной узлом на верхнем конце дуги. Это слишком громоздко, и не стоит говорить так более одного раза.

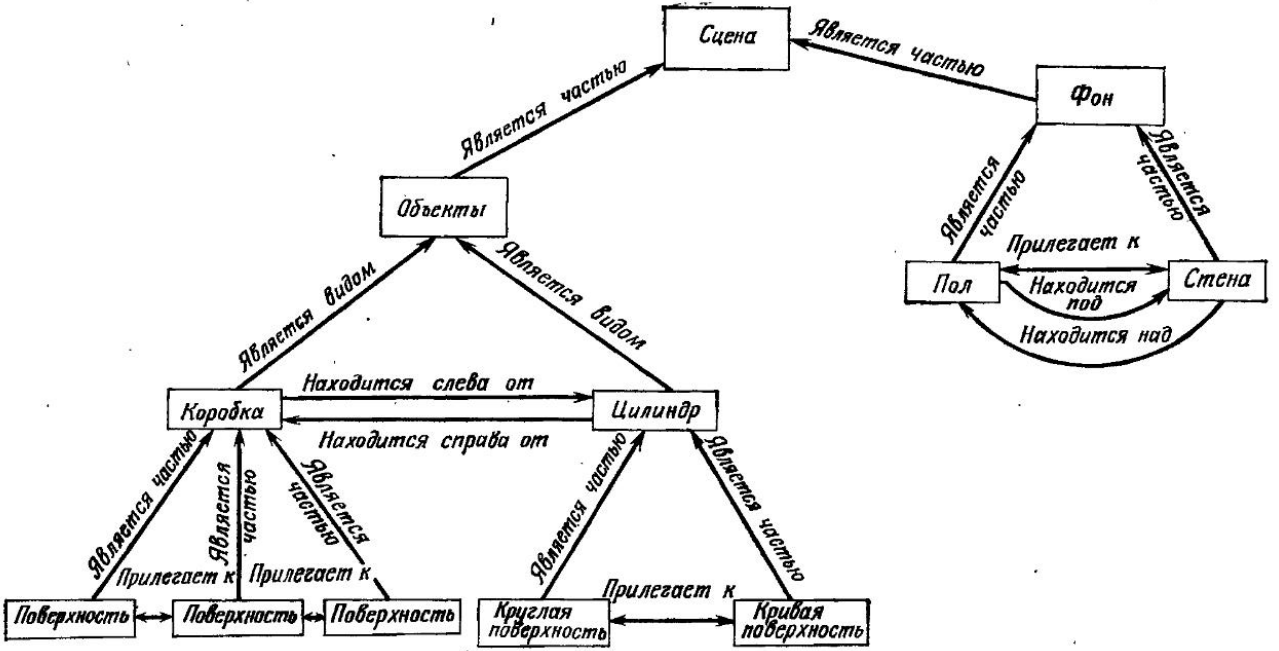


Рис. 12.6. Граф отношений.

Основную идею использования дуги для обозначения отношения можно обобщить несколькими очевидными способами. Во-первых, мы можем расширить класс разрешенных отношений с тем, чтобы включить в него каждое отношение, которое удобно устанавливать по изображению. Мы можем также рассматривать не деревья, а графы отношений, чтобы можно было задавать отношения между двумя произвольными узлами. (Граф в общем случае содержит замкнутые петли, а дерево их не содержит.) С помощью этих обобщений мы можем составлять более богатые описания, чем с помощью простых деревьев грамматического разбора.

В качестве иллюстрации предположим, что мы перерабатываем дерево разбора рис. 12.3 в более полное описание сцены рис. 12.1 графом отношений. Мы условимся применять выбранные произвольно отношения «являться частью», «являться видом», «прилегать к», «находиться слева от», «находиться справа от», «находиться над» и «находиться под». Одно из описаний этой сцены графом отношений показано на рис. 12.6. Для удобства мы поместили стрелки на каждой из дуг, чтобы показать смысл отношения, и превратили тем самым граф отношений в *направленный граф*. Направления стрелок были выбраны таким образом, что, если прочесть сначала метку узла в хвосте стрелки, затем метку стрелки и, наконец, метку узла в голове стрелки, получится грубый «перевод на русский язык» [1]). Заметим, что показанный граф отношений можно сделать более информативным, даже не вводя дополнительных отношений; так, например, круглая поверхность и кривая поверхность цилиндра связаны не только отношением «прилегать к», но и симметричной парой отношений «находиться над» и «находиться под». Это еще один пример существенного произвола в выборе количества информации, которую мы хотим включить в любое данное описание.

12.3. ТРЕХМЕРНЫЕ МОДЕЛИ

К задаче описания сцен, составленных из трехмерных объектов, ведут два явно различных пути. Один подход заключается в том, чтобы игнорировать трехмерную природу реальных объектов и описывать сцену в терминах двумерных конструкций, как мы это уже делали. Часто, однако, более полезно интерпретировать сцену в терминах трехмерных объектов. Таким образом, второй подход состоит в том, чтобы описывать не саму картинку в чистом виде, а трехмерную обстановку, с которой был снят вид сцены. Будем называть эти два альтернативных подхода *двумерным* и *трехмерным описанием сцены*. Чтобы проиллюстрировать различие между ними, рассмотрим снова очень простую сцену, показанную на рис. 12.1. Двумерное

[1]) В оригинале, конечно, сказано «перевод на английский язык».— *Прим. перев.*

описание этой сцены могло бы задавать с помощью каких-то формальных средств и с определенной степенью точности «три прилегающих четырехугольника, три коллинеарных сегмента прямой линии, один эллипс и один искаженный прямоугольник. С другой стороны, трехмерное описание может задавать «коробку и цилиндр, стоящие на полу перед стеной». Трехмерное описание значительно ясней, по крайней мере с точки зрения человеческого понимания, и больше соответствует нашей интуиции, чем двумерное описание [1]).

Краткое размышление приводит к выводу, что трехмерное описание может быть получено по единственной картинке только с помощью предварительной информации об объектах, которые входят в интересующее нас окружение. Фундаментальная причина этого заключена в природе перспективных преобразований, отображающих много точек в одну; существует бесконечно много трехмерных объектов, которые могут соответствовать некоторому единственному виду. Тогда для того, чтобы получать трехмерное описание сцены, нам нужен как набор трехмерных моделей объектов окружения, так и хорошо определенная процедура интерпретации заданной сцены в терминах этих моделей. Если окружение достаточно простое, набор моделей не нужно задавать слишком детально, и процедура подбора модели может быть тривиальной. Чтобы продолжить с помощью примера рис. 12.1, предположим, что все объекты окружающей обстановки представляют собой коробки и цилиндры. Тогда наша модель окружающей обстановки может быть задана в такой грубой форме: «коробка, у которой все края прямые, и цилиндр, у которого некоторые края кривые». Даже такая грубая модель скорее позволила бы нам интерпретировать рис. 12.1 в терминах трехмерных объектов, чем в терминах плоских фигур. Хотя этот пример элементарен, лежащая в его основе идея является важной; предварительные знания могут быть в виде информации о трехмерных объектах так же, как и в виде информации только о двумерных представлениях объектов.

Если мы рассмотрим более сложные виды окружения, то в общем случае будем вынуждены использовать более точные и полные модели. Часто, однако, можно перевести наиболее важные сведения о моделях в простые сведения об их изображениях. Чтобы проиллюстрировать случай такого рода, предположим, будто нам известно, что окружающая обстановка содержит объекты только двух типов: коробки и усеченные четырехгранные пирамиды. Для простоты предположим далее, что объекты всегда опираются одной из своих граней на плоскость пола (т. е. что они находятся в стандартной позиции). Из нашего предыдущего исследования перспективных преобразований мы знаем, что образы вертикальных линий прохо-

[1]) Интерпретация двумерной сцены в терминах трехмерных объектов фактически представляет собой одно из определений *восприятия* сцены.

дят через точку вертикального схода изображения, а образы перпендикулярных горизонтальных линий — через сопряженные точки схода на линии горизонта. Эти свойства позволяют нам превратить основные сведения о коробках и пирамидах в простые ограничения на изображающие их картинки.

В общем случае нам, по-видимому, не удастся вложить всю необходимую информацию о моделях в несколько простых тестов. Вместо этого мы должны будем выполнить более полное сравнение между каждой из трехмерных моделей и имеющимися картинками. В качестве введения к основному методу представим себе следующий мысленный эксперимент. Предположим для начала, что у нас есть конечное число моделей трехмерных объектов, и пусть нам дана картинка, показывающая один из этих объектов во всей его полноте. Как и раньше, мы определим объект (или, точнее, его модель) как совокупность конечного числа отобранных точек в трехмерном пространстве (например, вершин многогранника) и определим изображение как конечное число точек на плоскости. Задача состоит в том, чтобы установить, какой объект показан на картинке. Рассуждая абстрактно, мы можем брать каждую модель по очереди и помещать ее во все возможные положения относительно камеры. Для каждого положения вычисляется проекция модели на плоскость изображения и сравнивается с реальным изображением. Модель, для которой в некотором положении получается наилучшее согласование между ее проекцией и реальным изображением, объявляется моделью, показанной на картинке. Отметим, между прочим, аналогию между этим примером подбора модели и процессом сравнения с эталоном. В самом деле, каждая модель порождает семейство двумерных эталонов, по одному эталону на каждое относительное положение модели и камеры.

Задача вычисления наилучшего согласования между моделью и изображением может быть разделена на две подзадачи: задачу идентификации соответственных точек в модели и изображении и задачу вычисления степени согласования между этими двумя наборами соответственных точек [1]). Описывая наш неформальный вводный мысленный эксперимент, мы подвергли замалчиванию вопрос о нахождении соответственных точек, и, к сожалению, об этой задаче нельзя сказать в общем ничего достаточно глубокого. Мы можем заметить, что задача представляет собой более сложный вариант задачи установления соответствия, с которой мы сталкивались ранее в связи со стереоскопическим восприятием, но это соображение не особенно помогает в поисках общих решений. С другой стороны, в данном приложении у нас, безусловно, есть возможность использовать любое специальное свойство употребляемых

[1]) Строго говоря, мы должны говорить о согласовании между проекциями точек модели и точками изображения.

моделей. Так, например, если мы имеем дело с изображениями многогранников, простых геометрических свойств может оказаться достаточно, чтобы устанавливать соответствие между точками модели и изображения или, по крайней мере, чтобы уменьшить число неоднозначных соответствий. Во всяком случае, примем для целей обсуждения, что мы действительно установили необходимое соответствие между точками данной модели и точками изображения, и посмотрим теперь, как мы можем найти наилучшее согласование между изображением и множеством всех возможных проекций модели.

Задача расчета наилучшего согласования между моделью и картинкой весьма похожа на задачу калибровки камеры, которую мы обсуждали в гл. 10. В обоих случаях мы отыскиваем геометрические параметры перспективного преобразования, которые дают наиболее близкое расположение вычисленных точек изображения и наблюдаемых точек изображения. Чтобы вновь получить математические формулы, предположим, что модель содержит множество $\{\mathbf{v}_i\}$, $i=1, \ldots, n$, из n трехмерных точек, а соответственные точки изображения (подобранные заранее) суть $\{\mathbf{v}'_{pi}\}$, $i=1, \ldots, n$. Прямое перспективное преобразование позволяет выразить координаты точки изображения в плоскости картинки через координаты точки объекта и геометрические параметры преобразования. Для простоты примем, что камера никогда не поворачивается вокруг своей оптической оси, и поэтому преобразование определяется формулой (18) гл. 10. Это выражение в функциональной форме имеет вид

$$\mathbf{v}'_p = \mathbf{h}(\mathbf{v}, \boldsymbol{\pi}),$$

где символ $\mathbf{h}$ обозначает вектор-функцию, задающую вычисленные координаты образа точки $\mathbf{v}$ в плоскости картинки, а символ $\boldsymbol{\pi}$ представляет собой вектор, составленный из геометрических параметров, определяющих перенос и вращение камеры относительно модели. В последующем обсуждении мы примем, что вторая компонента как вектора $\mathbf{v}'_p$, так и его однородного представления $\tilde{\mathbf{v}}'_p$ стерта, поскольку мы видели, что эта компонента связана с расстоянием от объекта до объектива и не связана ни с какой реальной координатой картинки. Отметим теперь, что функция $\mathbf{h}$ достаточно сложна, и было бы трудно для заданного множества соответственных точек модели и изображения отыскивать компоненты вектора $\boldsymbol{\pi}$ методом прямого решения. Далее, возможен случай, когда число n слишком велико, и в результате вектор $\boldsymbol{\pi}$ оказывается определенным «чересчур сильно». В таких ситуациях обычным средством является применение процедуры градиентного поиска с тем, чтобы минимизировать подходящую функцию ошибок, например минимизировать величину

$$J(\boldsymbol{\pi}) = \sum_{i=1}^{n} \| \mathbf{v}'_{pi} - \mathbf{h}(\mathbf{v}_i, \boldsymbol{\pi}) \|^2.$$

В этом случае, однако, мы можем использовать вариант перспективного преобразования в однородных координатах, чтобы найти приближенное решение для вектора π. Если это решение окажется недостаточно точным, мы, по крайней мере, можем ожидать, что оно послужит разумной начальной точкой для процедуры поиска.

Попробуем набросать приближенное аналитическое решение задачи определения геометрических параметров для заданных соответственных множеств из n точек изображения и n точек объекта. Для начала перепишем формулу (17) гл. 10, которая задает общее перспективное преобразование в однородных координатах:

$$\tilde{\mathbf{v}}'_p = PGRT\tilde{\mathbf{v}}.$$

Затем мы определим матрицу V размерностью $4\times n$, содержащую n векторов $\tilde{\mathbf{v}}_i$, $i=1, \ldots, n$, в качестве столбцов, а также матрицу V' размерностью $3\times n$, содержащую в качестве столбцов n векторов $\tilde{\mathbf{v}}'_{pi}$. Другими словами, матрица V составлена из набора n точек модели (в однородных координатах), а матрица V' — из набора n наблюдаемых точек изображения. Определим матрицу H размерностью 3×4 как произведение матриц $PGRT$ со стертой второй строкой. Нам хотелось бы теперь иметь возможность сформулировать нашу задачу как задачу отыскания матрицы H, такой, что $HV = V'$. Или, на словах, мы ищем для заданных точек модели и изображения перспективное преобразование H (которое учитывает относительное расположение модели и камеры), такое, что каждая точка модели проектируется в соответствующую ей точку изображения. К сожалению, ситуация оказывается несколько более сложной. Во-первых, хотя матрица H содержит 12 компонент, имеется только пять независимых параметров, а именно это три параметра переноса и два параметра вращения камеры. Каждая из 12 компонент матрицы H является функцией этих параметров. Таким образом, в принципе мы не имеем возможности выбирать произвольную матрицу H. Мы проигнорируем эту трудность ради простоты изложения, но, поступая так, мы должны подчеркнуть, что результирующий анализ является только приближенным. Второе усложнение связано с тем обстоятельством, что мы не можем одновременно задать масштаб и точки объекта (в однородных координатах), и соответствующей ей точки изображения (также, конечно, в однородных координатах). А именно, если у нас есть точка объекта $\mathbf{v}=(x, y, z)^t$ и точка изображения $\mathbf{v}'_p=(x'_p, z'_p)^t$, мы не можем произвольно записать их однородные представления в виде $\tilde{\mathbf{v}}=(x, y, z, w)^t$ и $\tilde{\mathbf{v}}'_p=(x'_p, z'_p, w)^t$, поскольку для этого потребовалось бы, чтобы в перспективном преобразовании H одно и то же число w фигурировало в качестве последней однородной координаты и точки объекта, и соответствующей ей точки изображения. Чтобы избежать этой ловушки, мы введем диагональную матрицу масштаба D, которая

позволит нам масштабировать каждый однородный вектор изображения посредством произвольного коэффициента. В соответствии с этим мы сформулируем теперь нашу первоначальную задачу следующим образом: найти матрицу H размерностью 3×4 и диагональную матрицу D размерностью $n\times n$ так, чтобы

$$HV=V'D.$$

В этом матричном уравнении имеется $n+12$ неизвестных, из которых n входят в матрицу D, а 12 — в матрицу H, и всего имеется $3n$ уравнений. Следовательно, мы можем рассчитывать найти решение, если n равно по крайней мере 6. На практике мы, по-видимому, будем пытаться получить более чем шесть точек модели, и поэтому естественно решать это уравнение методом наименьших квадратов. А именно нам хотелось бы найти такие матрицы H и D, чтобы сумма квадратов разностей между компонентами HV и $V'D$ была минимальна. Эта задача минимизации приводит к обычным преобразованиям, и поэтому мы просто выпишем результат, который, к сожалению, имеет несколько беспорядочный вид. Пусть

$$A=V^t(VV^t)^{-1}V-I,$$

пусть

$$Q=(V')^tV',$$

и пусть S представляет собой матрицу, (i, j)-й элемент которой $s_{ij}=a_{ij}q_{ji}$. (Или, словами, матрица S образована поэлементным перемножением матриц A и Q^t.) Пусть n-мерный вектор $\mathbf{d}$ имеет в качестве компонент диагональные элементы матрицы D. Тогда решение задачи минимизации сводится к использованию в качестве диагональных элементов матрицы D решения однородного уравнения

$$S\mathbf{d}=0 \tag{1}$$

и к вычислению

$$H=V'DV^t(VV^t)^{-1}. \tag{2}$$

Прежде чем двигаться дальше, сделаем паузу и прокомментируем форму решения. Заметим, во-первых, что, хотя одиородная форма перспективного преобразования и полезна, она не может замаскировать существенно нелинейную природу этого преобразования. Использование диагональной матрицы D представляет собой ловкий прием, призванный компенсировать другой прием — однородные координаты. Подобным же образом определение матрицы S включает явно нелинейную операцию над матрицами.

После того как получена матрица H, мы можем найти значения геометрических параметров, приравняв соответствующие компоненты матрицы H и компоненты произведения $PGRT$. Например, с помощью непосредственного перемножения мы находим, что компонента (1, 1) произведения $PGRT$ равна $\cos\theta$, и поэтому мы можем

немедленно найти величину угла поворота камеры [1]). После того как наилучшие значения геометрических параметров найдены, модель можно спроектировать на плоскость картинки и сравнить с изображением. Степень достигнутого соответствия (измеряемая, скажем, суммой квадратов ошибок) представляет собой окончательный числовой результат процедуры и служит основой для принятия решения о том, подходит ли данная конкретная модель к представленным на изображении данным.

Элементы метода подбора модели появляются во многих различных формах. Мы упоминали раньше о возможности того, что в некоторых случаях важные сведения о моделях могут быть переведены в простые сведения об их изображениях. В отличие от этого предположим, что наша задача заключается в том, чтобы убедиться, что данная картинка отображает какие-либо новые признаки окружающей трехмерной обстановки, например либо объект передвинулся, либо появился новый объект. Основной подход к этой задаче сводится к тому, чтобы сравнить новую картинку с проекцией старой модели окружающей обстановки. В простом случае с неподвижной камерой это сравнение может быть выполнено поэлементным вычитанием последовательных картинок и регистрацией существенных изменений. Если камера между съемкой изображений двигалась, простое вычитание не годится; вместо этого мы, возможно, захотим запоминать трехмерную модель окружающей обстановки и сравнивать новую картинку с вычисленной проекцией модели.

Прежде чем завершить наше обсуждение, мы должны сделать замечание по поводу тесной связи между подбором модели и некоторыми разделами машинной графики. В обеих областях, например, задачи часто включают вычисление двумерного изображения трехмерной сцены. Это вычисление, в свою очередь, часто требует решения так называемой *проблемы невидимых линий*, т. е. задачи определения, какие части трехмерных объектов загорожены в данной проекции. На этом мы прекращаем обсуждение, а ссылки на нужную литературу даются в конце главы.

12.4. АНАЛИЗ МНОГОГРАННИКОВ

В последнем разделе мы обсуждали некоторые методы использования очень точных знаний об окружающей трехмерной обстановке (в предельном случае — полного знания структуры объектов). Очень часто, однако, такие полные знания недоступны; в самом деле, получение в точности такого рода информации может быть целью

[1]) В то же самое время приравнивание соответствующих элементов может также обнаружить грубость нашего приближенного анализа. Например, оказывается, что элемент (1, 2) произведения $PGRT$ равен $\sin\theta$, но нет никакой уверенности, что существует угол θ, косинус и синус которого равны соответственно элементам (1, 1) и (1, 2) вычисленной нами матрицы H.

анализа сцены. С другой стороны, если у нас совсем нет предварительных знаний о трехмерном мире, мы, очевидно, вынуждены довольствоваться весьма ограниченными видами анализа. В большинстве типичных случаев задача находится между этими крайностями; мы можем обладать предварительными знаниями о всей совокупности объектов окружающей обстановки, но не иметь предварительных знаний о детальной структуре. Среди задач этого класса анализ изображений многогранников (тел, ограниченных плоскостями) занимает выдающееся место.

В последующем изложении мы представим несколько общих методов для извлечения трех различных видов информации из картинок с многогранниками. Эти методы представляют значительный интерес не только потому, что многогранники являются основными геометрическими «строительными блоками», но также и потому, что мы должны досконально разобраться с этими простыми телами, прежде чем сможем надеяться анализировать более сложные тела.

12.4.1. СЕМАНТИКА ЛИНИЙ

Нас интересует здесь занимательная с виду задача поиска «смысла» в линиях картинки. Эта задача достойна внимания только в том случае, если, во-первых, мы сможем точно указать, что означает выражение «линия имеет смысл», и, во-вторых, если сможем найти разумные методы установления такого смысла. Получается так, что оба эти условия удовлетворяются; мы можем очень легко уточнить понятие смысла линии на изображении многогранника, и, более того, существует простой и остроумный способ установить его. Если мы сможем успешно приписать некоторый смысл каждой линии картинки, то анализ сцены в каком-то плане будет полным. Прежде чем начать, сделаем два допущения. Мы примем, что окружающая обстановка содержит только многогранники степени 3, т. е. в точности три плоских поверхности сходятся вместе в каждой из вершин многогранников. (Такие многогранникн называют иногда *трехгранными телами*.) Мы примем далее, что камера находится в *общем положении* относительно объектов окружающей обстановки. Это означает, что при небольшом изменении позиции камеры получается в основном такая же картинка — число линий и конфигураций, которые они образуют, не изменяется.

Наше первое важное наблюдение состоит в том, что (при наших допущениях) одна линия на картинке может иметь в точности четыре значения: она может представлять вогнутый край многогранника, не закрывающий выпуклый край или закрывающий (загораживающий) выпуклый край, который закрывает более удаленные части сцены либо с одной стороны, либо с другой. Для простоты мы будем называть незакрывающие выпуклые края просто выпуклыми краями, а закрывающие выпуклые края — закрывающими краями. Все

эти типы краев представлены в сцене рис. 12.7, на которой показан камин с приподнятым основанием. Например, линии AM и FG представляют собой вогнутые края, линии BN и DE — выпуклые края, а линии AB, BC и EI — закрывающие края. Важно отметить, что, поскольку мы имеем дело с объектами, ограниченными плоскостями, смысл линии должен оставаться неизменным по всей ее длине. В качестве обозначения мы будем отмечать выпуклые линии знаком плюс, вогнутые — знаком минус и закрывающие линии — стрелкой. Направление стрелки выбирается таким образом, что, если вы мысленно встанете на плоскость картинки и посмотрите на

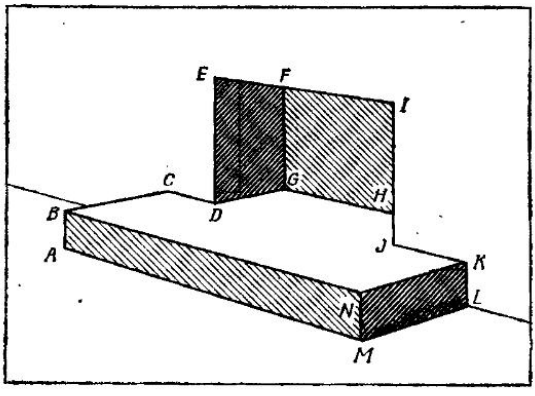


Рис. 12.7. Камин с основанием.

линию в направлении стрелки, *не*закрытая плоскость будет лежать справа от линии.

Второе важное наблюдение заключается в том, что вершины трехгранных тел бывают только четырех характерных типов. Если считать, что плоскости, определяющие вершину, делят окружающее пространство, грубо говоря, на октанты, то сам многогранник может занимать один, три, пять или семь этих октантов [1]). Основная идея отнесения вершины к некоторому типу становится значительно ясней с помощью иллюстрации. Рис. 12.8 показывает четыре возможных типа вершин; на каждой иллюстрации вершина помечена цифрой, означающей число октантов, занимаемых твердым веществом. Все четыре типа вершин имеются также на рис. 12.7. Вершины B и N относятся к типу 1, вершины E и I — к типу 3, вершины A и D (и некоторые другие) — к типу 5, вершины G и L — к типу 7. Важно отметить, что данный тип вершин может иметь на картинке

[1]) Строго говоря, мы должны использовать термин «октанты» только в том случае, когда плоскости взаимно перпендикулярны; тем не менее, общие замечания относятся к плоскостям, сходящимся под произвольными углами.

различные представления; например, вершины A и D обе относятся к типу 5, но они даже не обладают одинаковым числом расходящихся от них линий. Это подчеркивает тот факт, что тип вершины является свойством геометрического тела, а не вида объекта на картинке.

Поскольку один и тот же тип вершин может иметь более чем одно представление на картинке, естественно исследовать различные

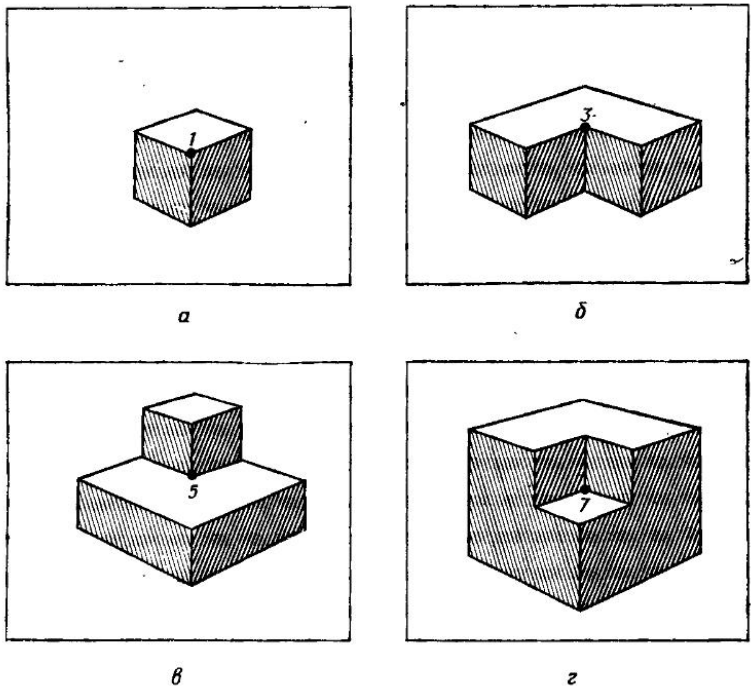


Рис. 12.8. Четыре типа вершин трехгранных тел.

возможные виды разных типов. К счастью, здесь не очень много возможностей; вершина каждого типа может рассматриваться только со стороны одного из окружающих пустых октантов, и, поскольку перемещение точки зрения в пределах одного октанта не дает существенно отличной картинки, число возможностей резко ограничено. Поэтому оказывается осуществимым составление списка в точности всех возможных представлений четырех типов вершин и создание таким образом «каталога», показанного на рис. 12.9, *а* — *м*. Каждая конфигурация помечена в соответствии с введенными нами обозначениями знаками «+» и «—» для линий, представляющих соответственно выпуклые или вогнутые края, и стрелками для закрывающих краев, причем примыкающие к ним плоскости оказываются

на картинке справа, если смотреть вдоль стрелки. Мы умышленно показали 12 возможных конфигураций в стандартных положениях, чтобы получить «нейтральный» каталог для применения в последующем анализе. Многие из этих конфигураций видны на рис. 12.7. Вершина N, например, легко опознается как вершина типа 1, пока-

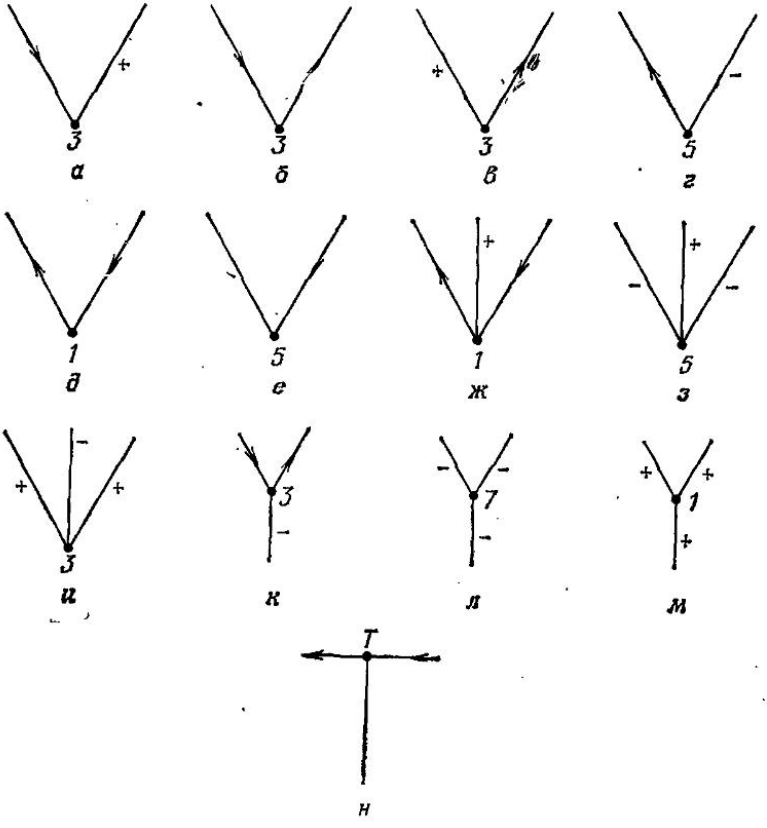


Рис. 12.9. Список всех возможных представлений вершин трехгранных тел.

занная на рис. 12.9, *м*; вершина D — как вершина типа 5 на рис. 12.9, *з*; вершина I — как вершина типа 3, показанная на рис. 12.9, *б*; и, наконец, вершину L, относящуюся к типу 7, можно опознать как вершину рис. 12.9, *л*.

Мы можем убедиться, что каталог типов вершин является полным, обратившись к тому факту, что любую вершину можно рассматривать только со стороны одного из окружающих пустых октантов. Таким образом, каталог показывает одну вершину типа 7, три вершины типа 5 и пять вершин типа 3. Он показывает только три

вершины типа 1 (вместо семи) в связи с учетом определенной симметрии. На рис. 12.9, *н* показана конфигурация в форме «*T*»; «*T*» всегда соответствует краю (поперечина «*T*»), закрывающему более удаленную часть объекта, но не вершине реального трехгранного тела. Краткое размышление показывает, что поперечина «*T*» должна быть всегда помечена стрелкой справа налево, а ножка «*T*» может в общем иметь любую метку.

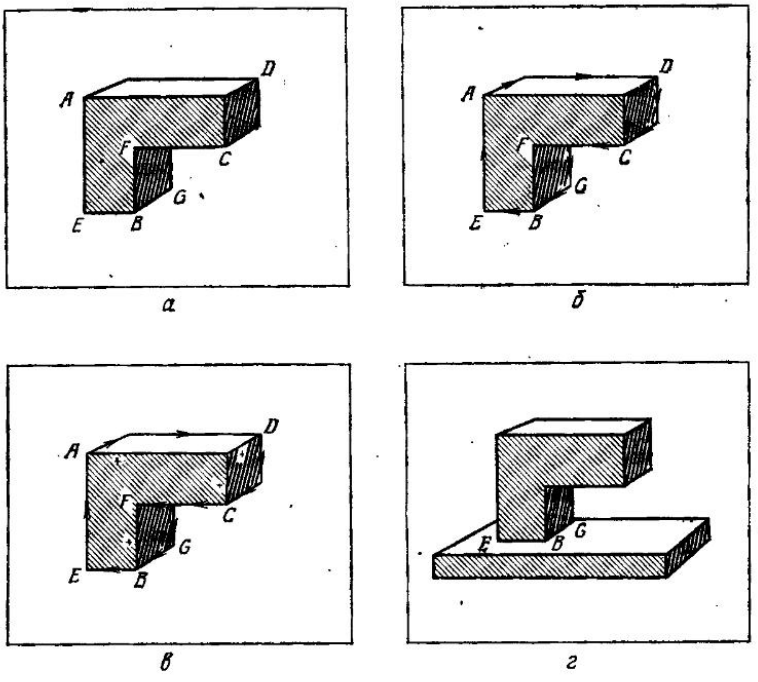


Рис. 12.10. Пример разметки вершин.

Рассмотрение рис. 12.9 ясно показывает, что тип вершины на картинке нельзя определить осмотром только этой вершины; в конце концов, каталог изображает шесть вершин в форме «*V*» (рис. 12.9, *а*—*е*), три вершины в форме «*W*» (рис. 12.9, *ж* —*и*) и три вершины в форме «*Y*» (рис. 12.9, *к* — *м*). Кроме того, вершина в форме «*T*» на рис. 12.9, *н* реально имеет четыре различных возможных значения в соответствии с четырьмя различными возможными метками на ее ножке. Если мы хотим, в конечном счете, пометить вершины (а следовательно, и линии) на данной картинке, мы, очевидно, можем это сделать, только используя какую-то информацию о контексте.

Чтобы проиллюстрировать основной метод, рассмотрим следующий пример. На рис. 12.10, *а* показано простое трехгранное тело — перевернутый блок в виде буквы *L*. Начиная процесс разметки ли-

ний, заметим, что внешняя граница L может быть помечена по часовой стрелке последовательностью стрелок, как это показано на рис. 12.10, *б* [1]). Теперь осмотрим вершины A, B, C и D на рис. 12.10, *б*; каждая из них относится к вершинам в форме «W» со стрелками на внешних отростках. Просматривая каталог типов вершин, находим, что только рис. 12.9, *ж* обладает этим свойством; следовательно, средние отростки вершин A, B, C и D могут быть помечены знаком «+», как показано на рис. 12.10, *в*. На рис. 12.10, *в* мы также поместили стрелку вблизи единственной вершины в форме «T», поскольку нам известно, что поперечина «T» всегда помечена стрелками, как показано на рис. 12.9, *н*. Таким образом, в этом примере мы легко смогли приписать единственную метку каждой линии. С другой стороны, рис. 12.10, *г*, лишь немного более сложный, представляет более трудную задачу; вершинам B, E и G не может быть приписана единственная законная метка. На то имеется серьезная причина: по картинке невозможно определить, стоит ли перевернутый блок L на плите или плавает над ней. Тем не менее единственная законная разметка, т. е. разметка, не ведущая к противоречиям на других вершинах, рассматривает обе эти ситуации как единственно возможные.

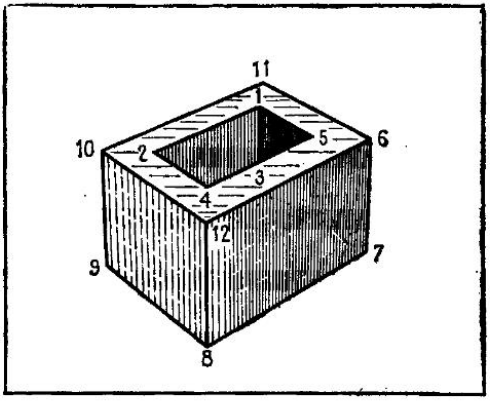


Рис. 12.11. Коробка с прямоугольным отверстием.

Суммируем итоги предыдущего примера формальной процедуры разметки вершин. Для обоснования такого рода формализма заметим сначала, что существо метода заключается в пробном приписывании одной из вершин некоторого типа согласно каталогу и в выяснении тех ограничений, которые накладываются этим приписыванием на элементы каталога, пригодные для смежных вершин. Этот процесс повторяется до тех пор, пока мы не придем к вершине (или не обнаружим, что попали в нее сразу), у которой пробная разметка линий не удовлетворяет никакой записи каталога, и в этом месте должна быть сделана попытка использовать другие пробные метки.

[1]) Это прямое следствие того факта, что, если мы прослеживаем внешнюю границу объекта на картинке по часовой стрелке, все плоскости объекта всегда лежат справа от нас. То есть граница на произвольной картинке всегда может быть помечена по часовой стрелке последовательностью стрелок.

Очевидно, что процесс приводит к систематическому поиску на дереве возможных разметок вершин. В соответствии с этим мы связываем с данной картиной трехгранного тела дерево поиска. Узлы дерева поиска соответствуют вершинам на картинке, а дуги, исходящие из данного узла, соответствуют возможным меткам ка-

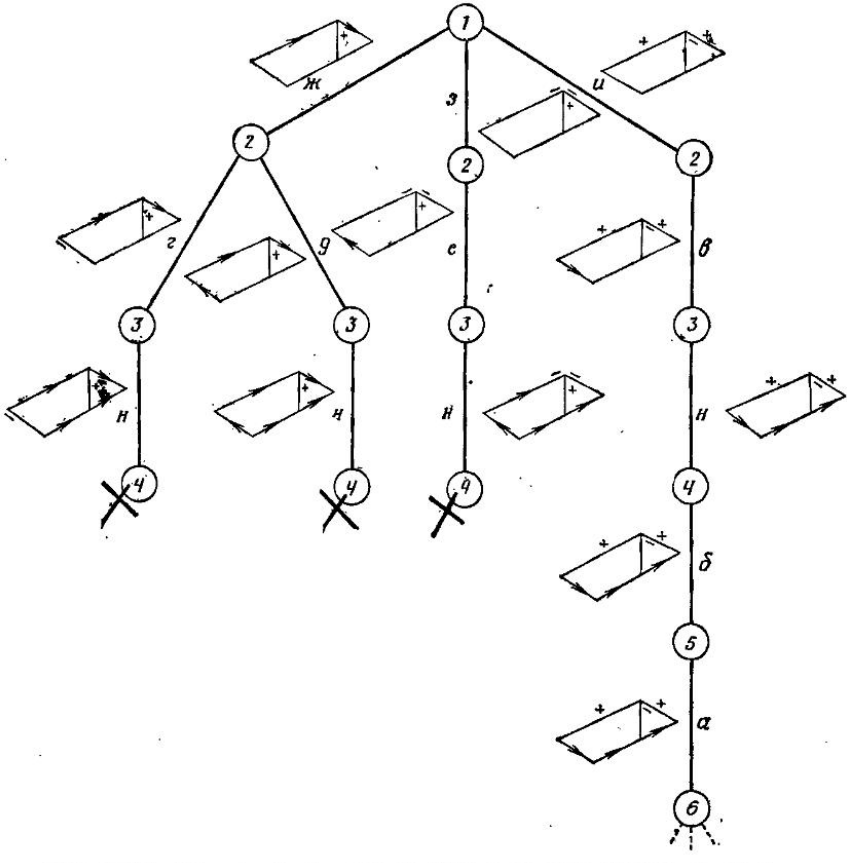


Рис. 12.12. Дерево поиска для коробки с прямоугольным отверстием.

талога, которые могут быть приписаны вершине. Чтобы проиллюстрировать эту процедуру, рассмотрим коробку с прямоугольным отверстием на рис. 12.11; начальная часть связанного с ней дерева поиска дана на рис. 12.12. Мы произвольно решили просматривать вершины в том порядке, в каком они пронумерованы. Вершина 1 — часть прямоугольного отверстия — может быть любой из трех вершин типа «W» в каталоге рис. 12.9. Дуги, исходящие из узла 1, могут быть поэтому отмечены буквами, соответствующими этим

трем элементам каталога. Для наглядности мы начертили также возле каждой дуги линии, замыкающие прямоугольное отверстие, и разметили их в соответствии с предписанием относящихся к ним типов вершин. Мы имеем теперь три различных альтернативных ограничения на вершину 2, соответствующих трем возможным отметкам вершины 1, и каждое из них должно исследоваться. Если вершина 1 соответствует элементу каталога (*ж*), вершина 2 должна удовлетворять условию «вершина типа *V* с исходящей стрелкой слева». Просматривая каталог, мы находим, что только элементы (*г*) и (*д*) удовлетворяют этому условию, и, следовательно, из крайнего левого узла 2 на рис. 12.12 спускаются две дуги. Подобным же образом используются другие альтернативные ограничения на вершину 2, чтобы заполнить второй уровень дерева. В этом месте мы имеем четыре ограничения (не все они различны) на вершину 3 — вершину типа «*T*». Поскольку эти ограничения затрагивают только ножку «*T*», мы видим из каталога, что поперечина может быть помечена стрелками справа налево (если рассматривать «*T*» в правильном положении). Теперь у нас есть четыре альтернативных ограничения на вершину 4. Каждому из этих ограничений соответствует полная, хотя и пробная, разметка линий вершины, поскольку смежные вершины 2 и 3 уже получили пробные отметки типов каталога. Три условия из четырех для вершины 4 не могут быть удовлетворены, т. е. не существует элементов каталога, подходящих к данной пробной разметке линий. В соответствии с этим в трех подходящих узлах дерево «обрезается», и в качестве жизнеспособного варианта остается только четвертый узел. Эта процедура поиска продолжается до тех пор, пока либо все вершины многогранника получат совместимые метки, либо все узлы на окончаниях дерева окажутся «обрезанными» и дальнейший поиск будет невозможен. В последнем случае мы можем быть уверены, что не существует трехгранного тела, соответствующего данной картинке, т. е. контурный рисунок содержит ошибку. В первом случае может оказаться, что имеется более чем один способ совместимой разметки вершин. Читатель может легко убедиться, что дерево рис. 12.12 можно достроить полностью единственным образом, дав тем самым единственную интерпретацию каждой линии рис. 12.11.

Прежде чем покончить с этой темой, сделаем несколько заключительных замечаний. Во-первых, отметим, что процедура позволяет нам делать некоторый вывод относительно смысла одной части сцены по информации о других ее частях. Эта процедура представляет собой поэтому особенно ясный, хотя и элементарный, пример использования контекста в анализе изображения. Заметим также, что процесс исследования дерева поиска может проводиться различными способами. Мы уже отмечали выше, что внешняя граница объекта может всегда быть размечена стрелками в направлении часовой стрелки, и при этом уменьшается число типов каталога,

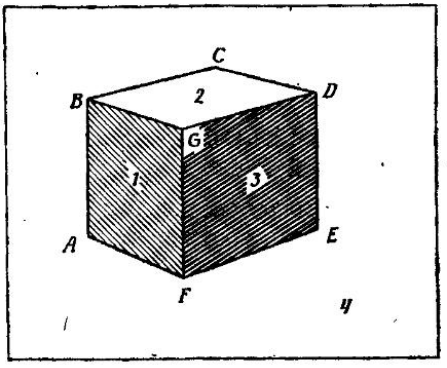
которые могут быть приписаны вершинам, находящимся на границе. Читатель может убедиться, что, хотя эта информация бесполезна при разметке первых пяти вершин рис. 12.11, она оказывает существенную помощь при разметке остальных вершин. И наконец, заметим, что каталог типов вершин не содержит повторений или неоднозначностей; тип вершины определяется точно и единственным образом сразу же после разметки ее линий. Таким образом, мы можем сделать общий вывод, что процесс разметки линий в соответствии с их смыслом позволяет нам интерпретировать некоторые части сцены однозначно и в то же время может обнаружить совершенно явные двусмысленности, разрешение которых возможно только с помощью более детального анализа.

12.4.2. ОБЪЕДИНЕНИЕ ОБЛАСТЕЙ В ОБЪЕКТЫ

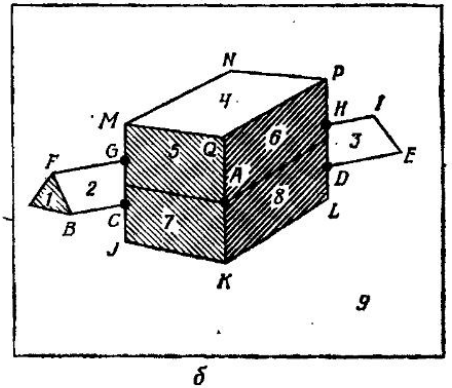
Фундаментальной проблемой в анализе изображений многогранников является проблема разделения изображения на отдельные объекты. В дальнейшем мы будем обсуждать эвристический подход к этому классу проблем — подход, который основан на догадке и интуиции, но не опирается на какой-либо полный теоретический анализ. Однако, прежде чем описывать какие-то специальные методы, следует сделать несколько предварительных замечаний.

Предположим, что у нас есть контурный рисунок, показывающий несколько многогранников, которые, возможно, закрывают друг друга, и мы хотим разделить картинку на отдельные тела. Чтобы сформулировать задачу несколько более точно, мы можем рассматривать контурный рисунок как набор отделенных друг от друга областей; задача заключается в соединении этих областей в группы таким образом, чтобы каждая группа представляла на картинке один многогранник. Заметим теперь, что, если у нас имеются предварительные сведения об определенном многограннике из окружающей обстановки, мы можем для решения задачи использовать какой-то вариант метода подбора модели; здесь же мы примем, что знаем только то, что все объекты суть многогранники. Первое, что нужно отметить при таком допущении,— это то, что задача не имеет однозначного решения. Чтобы показать это, рассмотрим снова рис. 12.10, *г*. Мы отмечали раньше возможность того, что перевернутый блок «*L*» может либо опираться на плиту, либо плавать над ней. Если имеет место последний случай, блок «*L*» и плита, безусловно, различные объекты; если первый, то блок «*L*» либо связан с плитой (в этом случае они вместе образуют единый невыпуклый многогранник), либо представляет собой отдельное тело. Здесь имеется дополнительно и более глубокий вид двусмысленности, которую следует учитывать: каждая область сцены может интерпретироваться как основание объекта пирамидальной формы. Вершины пирамид закрыты основаниями, а сами пирамиды разме-

щены в пространстве таким образом, что их основания как раз образуют области картинки. (Заметим, что мы не приняли никакой гипотезы об опоре для объектов; мы не приняли, что камера находится в общем положении, и, наконец, мы не приняли, что все многогранники степени 3.) В свете этих замечаний очевидно, что поставленная задача разделения картинки на объекты не является корректной, поскольку не имеется тестов для проверки правильности предполагаемого решения. Тогда самое большое, на что мы можем надеяться, будет метод разделения, дающий «разумные» ответы для большинства картинок, т. е. мы можем рассчитывать на решения, которые большинство людей сочтет «честными» и правдоподобными.



а



б

Рис. 12.13. Две простых сцены.

Чтобы обосновать эвристический подход, которому мы будем следовать, рассмотрим простой многогранник, показанный на рис. 12.13а. В этом простейшем из примеров мы, конечно, ожидаем, что любой разумный метод разделения отнесет области 1, 2 и 3 к одной группе, а область 4 (фон) к другой. Если мы просмотрим семь видимых вершин многогранника, мы увидим, что три имеют форму V (по определению предыдущего раздела), три — форму W и одна — форму Y. Такой осмотр вместе с тем обстоятельством, что области 1, 2 и 3 составляют одну группу, подсказывает следующие эвристические правила:

1. Вершина типа Y свидетельствует о том, что три области, сходящиеся в Y, должны быть сгруппированы вместе.

2. Вершина типа W свидетельствует о том, что две области, заключенные в острых углах W, должны быть сгруппированы вместе.

На тех же основаниях мы можем также выдвинуть правило, согласно которому вершина типа V свидетельствует о том, что две об-

ласти, сходящиеся в V, не должны быть сгруппированы вместе, но в данном изложении мы ограничимся только «положительными» утверждениями. Рис. 12.13, *б*, на котором показаны две уложенные друг на друга коробки и треугольная призма позади них, подсказывает еще несколько эвристических правил группировки областей на основании анализа вершин. Вершина A, которую мы будем называть вершиной типа X, подсказывает следующее эвристическое правило:

3. Вершина типа X свидетельствует в пользу группировки областей, лежащих по разные стороны «сквозной прямой» линии в X. (На рис. 12.13, *б* вершина A свидетельствует в пользу объединения областей 5 и 6 в одну группу и областей 7 и 8 в другую.)

Теперь, наконец, рассмотрим вершины C и D типа T. Мы видели в предыдущем обсуждении, что поперечина T всегда закрывает более удаленную часть сцены (это справедливо независимо от того, имеют многогранники степень 3 или нет). Однако тот факт, что ножки двух T коллинеарны, говорит больше, чем просто о загораживании; он подсказывает, что области, лежащие с одной и той же стороны от каждой из ножек, являются частями одного и того же объекта. Здесь может оказаться, что по одну и ту же сторону от каждой из ножек лежит одна область; в этом случае свидетельство в пользу группировки областей является ценным, но избыточным. Заметим в качестве примера, что вершины C и D на рис. 12.13, *б* свидетельствуют о том, что области 2 и 3 принадлежат одной и той же группе; они дают также избыточное свидетельство о том, что область 9 вблизи точки C принадлежит к той же группе, что и область 9 вблизи точки D. На основании этого примера мы примем следующее эвристическое правило:

4. Две вершины в форме коллинеарных T свидетельствуют в пользу группировки областей, лежащих по одну и ту же сторону от ножек T; если по одну и ту же сторону от обеих ножек лежит одна область, это свидетельство не принимается во внимание.

Эти четыре эвристических правила проиллюстрированы на рис. 12.14, *а* — *г*, где мы использовали пунктирные линии, чтобы связать области в соответствии со свидетельством, даваемым вершинами. Для целей последующего обсуждения мы определим термин *связь* как элемент свидетельства, подсказываемого некоторой вершиной, в пользу соединения вместе двух областей в качестве частей одного и того же объекта.

Мы только что видели, что вершины (на изображении многогранников) свидетельствуют в пользу объединения некоторых областей в качестве частей объектов. Эвристические правила, которые мы сформулировали, являются разумными и правдоподобными, но было бы, конечно, удивительно, если бы удалось доказать, что они непогрешимы; ведь, в конце концов, они выведены только на основе не-

скольких простых примеров. Кажется ясным, что единственная связь сама по себе не должна рассматриваться как достаточно сильное свидетельство в пользу безоговорочного объединения двух связанных областей в качестве частей одного и того же объекта. Вместо того мы можем захотеть анализировать отношения между связями, чтобы накапливать более сильные свидетельства в пользу объединения областей. Мы перейдем к примеру, чтобы проиллюстрировать один метод. На рис. 12.15, *а* показана простая сцена, содержащая

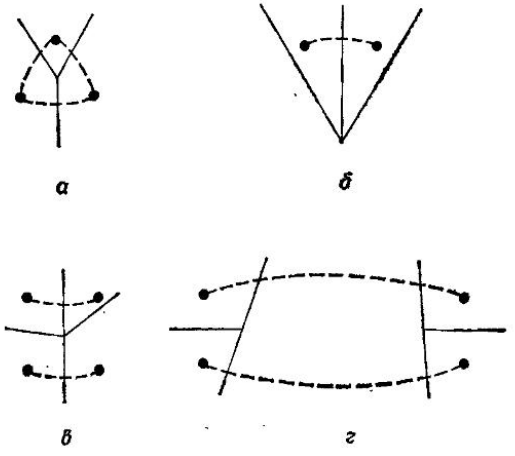
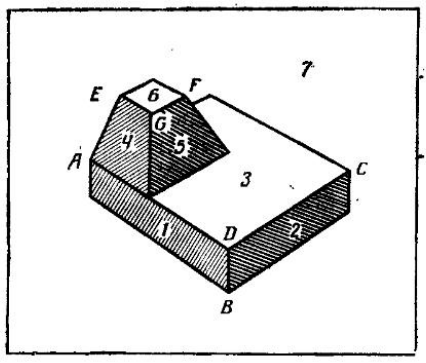


Рис. 12.14. Иллюстрация четырех эвристических правил.

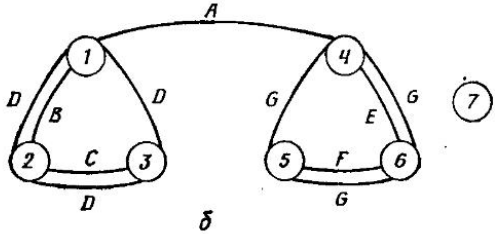
усеченную пирамиду, установленную на плите. Исследование вершин дает информацию о связях, показанную на рис. 12.15, *б*, где мы представили области картинки узлами графа, а связи между областями — дугами, соединяющими узлы. Для ясности каждая из дуг (связей) помечена символом вершины, по которой она получена; например, связь между узлами (областями) 1 и 3 является результатом того факта, что вершина D имеет форму Y, и соответствует связям на рис. 12.14, *а*. Осмотр рис. 12.15, *б* подтверждает подозрение, что одиночные связи сами по себе являются недостаточным свидетельством в пользу объединения областей; области 1 и 4, которые «явно» принадлежат разным объектам, связаны. Чтобы обойти эту трудность, мы примем следующее эвристическое правило объединения узлов (а следовательно, и областей):

Два узла следует объединить, если между ними имеются по крайней мере две связи. Все связи от этих двух узлов к другим узлам соединяются со вновь сформированным «групповым узлом».

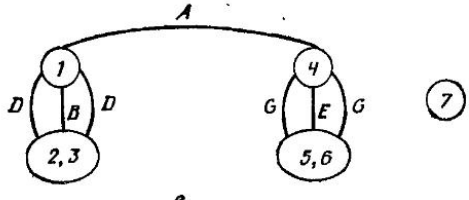
Рис. 12.15,*в* иллюстрирует применение этого правила к графу рис. 12.15, *б*. На рис. 12.15, *б* имеются несколько пар соединенных



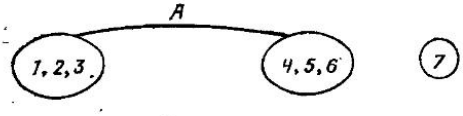
а



б



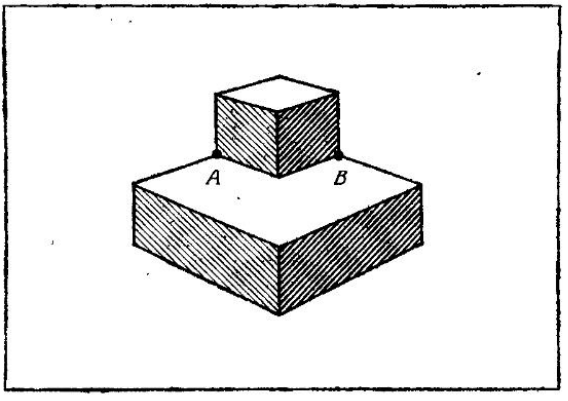
в



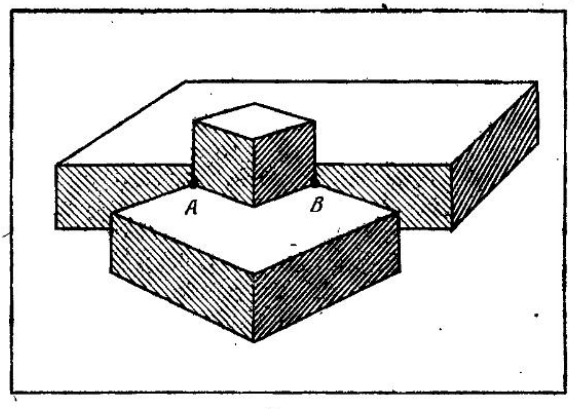
г

Рис. 12.15. Пример объединения областей.

двойными связями узлов; мы произвольно применили правило к узлам 2 и 3 и к узлам 5 и 6. Заметьте, что в соответствии со второй частью правила связи от остальных узлов подключены к новым групповым узлам. Поскольку граф рис. 12.15, *в* содержит узлы, связанные по крайней мере двумя дугами, можно применить снова то же



а



б

Рис. 12.16. Две сцены, представляющие трудность для объединения областей.

самое эвристическое правило. На рис. 12.15, *г* показан результат такого применения; больше нет узлов, соединенных по крайней мере двумя дугами, и поэтому процесс заканчивается. Окончательная группировка областей определяется узлами последнего графа. В данном случае области 1, 2 и 3 объединены в один объект, области 4, 5 и 6 образуют другой объект и, наконец, область 7 — фон — образует третий объект. Таким образом, в этом примере процесс перво-

начального обнаружения связей и последующего слияния узлов дает удовлетворительный результат. Читатель может также убедиться, что та же самая процедура дает удовлетворительные результаты для сцен рис. 12.13, *а*, *б* и, действительно, для многих других более сложных сцен.

Хотя метод, представленный выше, работает удовлетворительно на многих сценах, оказывается также, что его не очень трудно обмануть. В сцене рис. 12.16.*а* вершины A и B вносят достаточно связей, чтобы вызвать объединение всех областей, включая фон, в один объект. Мы можем пожелать ввести новые эвристические правила или изменить некоторые из первоначальных правил, чтобы бороться с недостатками такого рода. Одна простая модификация, достаточная для данного случая, состоит в том, чтобы заменить правило 1 следующим эвристическим правилом:

1′. Вершина типа Y свидетельствует о том, что три области, сходящиеся в Y, должны быть объединены, *если только одна из них не является фоном, и в этом случае никакие области не должны объединяться.*

Читатель может убедиться, что это правило (которое неявно предполагает, что мы заранее знаем, какие области представляют фон) приводит к удовлетворительным результатам для сцены рис. 12.16, *а*. Мы не должны, однако, ожидать, что эта единственная модификация даст нам непогрешимый набор правил. Доводы, которые привели нас к правилу 1′, оказываются несостоятельными на рис. 12.16, *б*; здесь вершины A и B создают достаточно связей, чтобы вызвать объединение всех областей, кроме фона, в один объект.

Закончим это обсуждение несколькими заключительными замечаниями. Мы видели, что трудная с виду задача разделения изображений многогранников на отдельные тела может на самом деле частично решаться посредством замечательно простого набора методов. В пределах некоторого класса изображений многогранников эти методы оказываются совершенно общими. Они не требуют, чтобы многогранники были степени 3, были выпуклыми или находились в общем положении; и они, конечно, не требуют никакой информации об отдельных объектах сцены. С другой стороны, методы, представленные здесь, несовершенны; даже несколько более развитые формы этих методов оказываются несостоятельными на некоторых сценах. К сожалению, не так легко охарактеризовать класс сцен, для которого определенный член этого семейства методов дает правильные результаты. Может быть, наиболее полезный общий вывод состоит в том, что, как показывает опыт, методы этого семейства часто работают очень хорошо на обширном множестве весьма сложных картинок, но могут отказывать на некоторых простых сценах.

12.4.3. МОНОКУЛЯРНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

Важной задачей в анализе сцен является задача определения по картинке (или по картинкам) трехмерной структуры видимой части объекта. В предыдущем обсуждении стереоскопического восприятия мы показали, как можно решить эту проблему, используя стереопару изображений; сейчас нас интересует решение, для которого требуется только одна картинка. Конечно, если мы совершенно ничего не знаем об интересующем нас объекте, то вполне понятно, что его трехмерную структуру нельзя определить по одной картинке [1]). В последующем изложении принятое допущение будет состоять в том, что интересующий нас объект есть многогранник. Наша первая цель сводится к тому, чтобы разработать общий метод определения трехмерной структуры по информации, поставляемой единственной картинкой, и по «небольшому числу» дополнительных фактов. Затем мы усовершенствуем этот метод, приняв дополнительное ограничение, что многогранные объекты имеют степень 3.

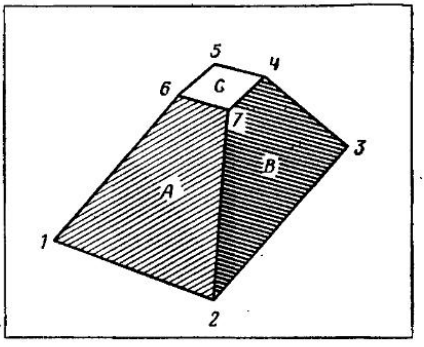


Рис. 12.17. Многогранник.

Для начала обратимся вновь к некоторым основным свойствам перспективных преобразований. Для конкретности мы свяжем эти свойства с простым многогранником, показанным на рис. 12.17. Каждая точка этой сцены, и в особенности каждое изображение вершины, определяет положение луча в пространстве. Каждая вершина реального трехмерного тела должна лежать на луче, который исходит из центра объектива камеры, проходит через образ вершины и продолжается в пространстве; точное положение вершины фиксировано, если мы знаем ее расстояние от центра объектива. Таким образом, если дана картинка (монокулярная), задача определения трехмерной структуры многогранника эквивалентна задаче определения расстояний от центра объектива до каждой из его семи вершин. Должно быть ясно, что картинка вместе с тем дополнительным фактом, что показанный объект есть многогранник, не дает достаточно информации для решения этой задачи. Предположим, однако, что мы также знаем положение в трехмерном пространстве

[1]) Хотя одной картинки недостаточно, можно довольствоваться единственной позицией камеры. Если камеру можно точно сфокусировать на некоторую часть объекта, расстояние от камеры до части объекта может быть определено по данным, полученным при фокусировке. По поводу исследования такого метода мы отсылаем читателя к литературе, приведенной в конце этой главы.

вершин 1, 2, 3 и 7. Поскольку три точки задают положение плоскости, мы можем использовать трехмерные координаты вершин 1, 2 и 7, чтобы определить положение в пространстве плоскости A. Заметим теперь, что вершина 6 лежит на плоскости A; следовательно, ее положение фиксировано на пересечении соответствующего ей луча с этой плоскостью. Подобным же образом положение в пространстве вершины 4 можно определить, зная положения вершин 2, 3 и 7. В этой ситуации известны положения в пространстве вершин 4, 6 и 7, поэтому плоскость C фиксирована, и можно найти положение вершины 5. То есть в этом примере и для данной картинки достаточно иметь информацию о том, что показанный на картинке объект есть многогранник, и знать положение в пространстве вершин 1, 2, 3 и 7, чтобы определить положение в пространстве остальных вершин и, следовательно, трехмерную структуру видимой части многогранника.

В связи с предыдущим примером естественно задать вопрос, достаточно ли в общем случае четырех любых «известных» вершин для определения трехмерной структуры. Ответ на этот вопрос отрицательный: если четыре точки не являются независимыми, т. е. если любые три из них лежат на одном ребре или если все они лежат на одной грани, то, как легко показать, этих точек недостаточно. Предположим, однако, что мы знаем четыре независимые точки многогранника, но допустим, что невозможно сцепить их вместе, как в предыдущем случае. Например, для рис. 12.17 мы можем знать пары противоположных вершин, таких, как 1, 2, 4 и 5; будет ли их достаточно, чтобы определить структуру? Для этого примера ответ положителен. Обозначив символом d неизвестное расстояние от объектива до вершины 7, можно задать вершину 6 через d и затем задать вершину 5 через d; но положение вершины 5 уже известно, поэтому можно найти величину d и определить положение всех вершин.

Описанный выше метод приводит к наблюдению, что некоторые характерные точки тела лежат более чем в одной плоскости. Поэтому метод можно формализовать, выразив это наблюдение в аналитической форме. Мы будем для простоты составлять все уравнения в системе координат, начало которой совпадает с центром объектива. Заметим прежде всего, что уравнение любой плоскости многогранника имеет вид

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{v} = 1,$$

где $\mathbf{x}$ — трехмерный вектор точки, лежащей на плоскости, а $\mathbf{v}$ — нормальный относительно плоскости трехмерный вектор, длина которого обратна расстоянию от начала координат до плоскости. Пусть P — произвольная точка, лежащая на плоскости; ее образ, скажем P', задает луч в пространстве. Поскольку мы поместили начало координат в центр объектива, любая точка на луче имеет вид $a\mathbf{u}$,

где $\mathbf{u}$ — единичный трехмерный вектор, направленный по лучу, и a — расстояние от точки до начала координат. Тогда условие того, что точка P лежит на луче, заданном ее образом, и одновременно на плоскости, определяемой вектором $\mathbf{v}$, может быть записано в виде

$$a\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}=1,$$

или

$$\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}=\frac{1}{a}=b.$$

Применим этот простой анализ к сцене рис. 12.17. Мы будем индексировать переменные буквами или цифрами, чтобы указать плоскость или точку, к которой они относятся. Поскольку вершины 1, 2, 6 и 7 находятся на плоскости A, мы напишем

$$\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{v}_A=b_1,$$
$$\mathbf{u}_2\cdot\mathbf{v}_A=b_2,$$
$$\mathbf{u}_6\cdot\mathbf{v}_A=b_6,$$
$$\mathbf{u}_7\cdot\mathbf{v}_A=b_7.$$

Подобным же образом для плоскостей B и C мы напишем

$$\mathbf{u}_2\cdot\mathbf{v}_B=b_2,$$
$$\mathbf{u}_3\cdot\mathbf{v}_B=b_3,$$
$$\mathbf{u}_4\cdot\mathbf{v}_B=b_4,$$
$$\mathbf{u}_7\cdot\mathbf{v}_B=b_7$$

и

$$\mathbf{u}_4\cdot\mathbf{v}_C=b_4,$$
$$\mathbf{u}_5\cdot\mathbf{v}_C=b_5,$$
$$\mathbf{u}_6\cdot\mathbf{v}_C=b_6,$$
$$\mathbf{u}_7\cdot\mathbf{v}_C=b_7.$$

Эта система линейных уравнений отображает тот факт, что различные характерные точки (в этом примере — все вершины) лежат на определенных плоскостях многогранника. Векторы $\mathbf{u}_i$ определяются прямо по картинке и, следовательно, известны. Каждая из трех плоскостей определяется одним трехмерным вектором, а каждая из семи точек — скаляром. Следовательно, мы имеем систему из 12 уравнений с 16 неизвестными. Если уравнения линейно независимы, можно найти единственное решение, зафиксировав любую четверку неизвестных переменных, при условии, как мы видели выше, что фиксированные переменные независимы.

Поучительно найти для случая произвольной картинки (с многогранником) число уравнений и переменных, используемых для вы-

ражения инцидентности точек и плоскостей. Для задания каждой плоскости необходимы три числа, а для каждой характерной точки — еще одно число, поэтому

$$(\text{Число переменных}) = 3 \times (\text{Число плоскостей}) + \\ + (\text{Число характерных точек}).$$

С другой стороны, для каждой характерной точки на каждой плоскости может быть записано одно уравнение, поэтому

$$(\text{Число уравнений}) = \sum_{\substack{\text{по всем} \\ \text{плоскостям}}} (\text{Число характерных точек на плоскости}).$$

Разность между числом переменных и числом уравнений дает нижнюю границу для числа переменных, которые должны быть известны при определении трехмерной структуры многогранника. Нижняя граница достигается, когда результирующая система линейных уравнений имеет полный ранг [1]).

До сих пор разработанный метод был полностью общим. Для заданной произвольной картинки инцидентность точек и плоскостей можно выразить в виде линейной системы, обычными методами найти ранг системы и определить число свободных параметров. Если какими-либо другими средствами можно найти положения необходимого числа точек (независимых), то уравнения могут быть решены единственным образом, и задача определения трехмерной структуры оказывается решенной.

Теперь нам хотелось бы дать другую интерпретацию описанной выше процедуры. Интерпретация ограничена картинками трехгранных тел, но представляет интерес, поскольку она уточняет расплывчатое понятие «сцепления» одной грани многогранника с другой. Интерпретация основана на использовании определенного вида *дуального графа* изображения многогранника. Узлы дуального графа соответствуют видимым плоскостям многогранника; два узла дуального графа связаны дугой, если у их граней имеется общее (и видимое) ребро [2]). Однако, если две плоскости связаны более чем одним ребром (которые все обязательно коллинеарны), между соответствующими узлами помещается только одна дуга. Рис. 12.18, *а* показывает ступенчатое трехгранное тело; соответствующий дуальный граф показан на рис. 12.18, *б*. Чтобы показать, как можно

[1]) То есть когда ранг матрицы системы равен числу неизвестных.— *Прим. перев.*

[2]) Заметим, что процедура разметки линий, обсуждавшаяся выше, позволяет нам установить по картинке, имеют ли две грани многогранника общее ребро. Две грани имеют общее ребро, если разделяющая их линия помечена либо плюсом, либо минусом; если разделяющая их линия помечена стрелкой, она представляет собой закрывающий край, а не общее ребро.

использовать дуальный граф для интерпретации последовательного процесса сцепления одной грани многогранника с другой, предположим, что положения вершин A, C, D и E известны; тогда известны положения граней 1 и 5. Чтобы показать, что эти грани известны, мы сольем вместе соответствующие узлы, как это видно на рис. 12.18, *г*; другие дуги, связанные с узлами 1 и 5, остаются связанными и после слияния, так же как и в процессе слияния узлов, обсуждавшемся выше. Чтобы поддержать соответствие с последующими шагами, рис. 12.18, *в* показывает предварительную дугу, введенную между узлами 1 и 5. Мы будем следовать правилу, что узлы могут быть слиты, если они связаны по крайней мере двумя дугами. Продолжение показано на рис. 12.18, *г*, где слитный узел «1,5» означает, что положение граней 1 и 5 в трехмерном пространстве известно. Теперь узел «1,5» связан двумя дугами с узлом 2. Это означает, что грань 2 имеет два общих неколлинеарных ребра с гранями, положение которых известно; поскольку известны положения граней, положения ребер также известны. Поскольку плоскость определяется двумя лежащими на ней произвольными неколлинеарными линиями, положение грани 2 также известно. Чтобы отобразить этот факт, узел 2 сливается с узлом «1,5», образуя узел «1, 5, 2», как показа-

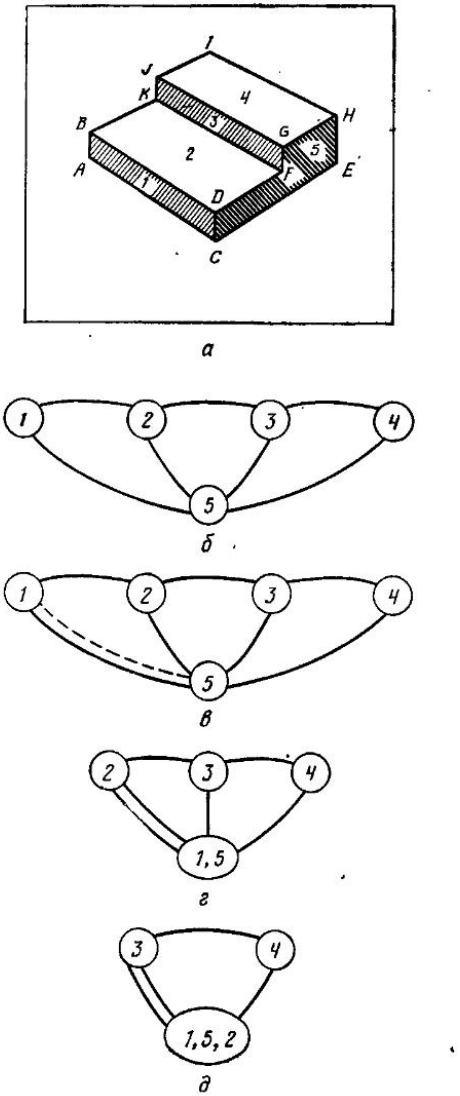


Рис. 12.18. Слияние дуального графа трехгранного тела.

но на рис. 12.18, *д*. Этот процесс в нашем примере может повторяться, пока все первоначальные узлы не сольются в один.

Проиллюстрированный выше процесс реально представляет собой всего лишь способ слежения на всех стадиях анализа за теми гранями многогранника, положение которых в трехмерном пространстве уже было определено. Основное правило слияния двух узлов, если они связаны по крайней мере двумя дугами, представляет собой другую формулировку условий, при которых положение одной грани может быть найдено по известным положениям смежных с ней других граней. Первоначальное добавление дуги может рассматриваться как некоторая уловка, позволяющая развязать процесс. Она равносильна утверждению, что две грани имеют общие неколлинеарные ребра; это явно невозможно, но дополнительное ребро представляет собой фиктивный эквивалент того, что положения двух плоскостей заданы. В данном примере это был случай, когда добавление единственного ребра позволяет нам слить все узлы в один. Когда такое имеет место, т. е. когда мы можем добавить единственную дугу таким образом, что все узлы могут быть последовательно слиты вместе, мы говорим, что граф *1-сливаемый*. Мы неформально показали, что структура видимой части трехгранного тела может быть определена по четырем известным точкам, если дуальный граф 1-сливаемый. В более общем случае дуальный граф *k-сливаемый*, если нужно добавить не меньше, чем k дуг, чтобы посредством ряда слияний уменьшить граф до единственного узла. Нетрудно показать, что структура видимой части трехгранного тела определяется по $k+3$ независимым точкам во всех случаях, когда дуальный граф k-сливаемый. Например, многогранник рис. 12.10, *а* имеет 2-сливаемый дуальный граф, и легко убедиться, что для определения видимой структуры должны быть известны положения пяти точек.

С практической точки зрения дуальный граф приводит к альтернативному решению задачи определения числа степеней свободы в трехмерной структуре многогранника, а именно задача определения ранга системы линейных уравнений может быть заменена задачей определения степени сливаемости графа. Более того, конкретная последовательность слияний соответствует последовательности шагов, которые может сделать человек, раскрывая трехмерную структуру посредством цепного процесса. Это само по себе может привести к полезным догадкам, поскольку это демонстрирует шаги процесса, а не прячет их в одном «глобальном» процессе типа обращения матрицы.

12.5. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ И ИСТОРИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Исследователи, работавшие в области анализа сцен, в течение некоторого времени открыли много задач, требующих методов решения, основанных на описании, а не на классификации. Первоначальная работа в этом направлении была основана на синтаксическом анализе, и, может быть, первый пример разложения картинки на первичные элементы был дан Гримсдейлом и др. (1959). Синтаксический подход получил дополнительный толчок в результате работ Кирша (1964) и Нарасимхана (1964, 1969), в которых были представлены формальные грамматики для целей обработки изображений. О применении синтаксических методов к задаче автоматического анализа хромосом сообщил Ледли (1964), который мог использовать только подход, основанный на описании границы. Шоу (1969, 1970) разработал развитый «язык описания изображений», фрагмент которого мы представили как метод стандартных точек притяжения. Гренандер (1969) дал абстрактное математическое описание механизма преобразования идеальных, или незашумленных, объектов в реальные. Пфальц и Розенфельд (1969) в попытке найти естественное обобщение синтаксического метода на два измерения ввели *грамматику сетей*. Эванса (1970) особенно интересовало определение по набору сцен грамматики, которая может их порождать. Уинстон (1970) использовал графы отношений в исследовании, направленном на построение абстрактных моделей объектов по набору сцен. Два хороших обзора по синтаксическим методам в анализе сцен были написаны Миллером и Шоу (1968), а также Фу и Свайном (1971). Фельдман и Грис (1968) написали, видимо, самое лучшее введение в обширную литературу по синтаксическому анализу и грамматическому разбору; Эрли (1970) описал особенно эффективный алгоритм грамматического разбора.

О применении трехмерных моделей в анализе сцен, которое в ретроспективе можно считать прямым подходом, не было известно ничего до появления имевшей большой резонанс статьи Робертса (1965). Дуда и Харт (1970) использовали частичные трехмерные модели для управления анализом сцены, выполняемым подвижным роботом. Барроу и Поппельстоун (1971) хранили информацию о модели в виде графов отношений, описывающих скорее изображения объектов, чем сами объекты. Методы подбора модели часто требуют решения проблемы невидимых линий — проблемы определения той части трехмерного объекта, которая видна в данной проекции. Алгоритмы для решения такой задачи были описаны Уорноком (1968), Лоутрелом (1970) и Букнайтом (1970).

Кажущаяся простота многогранных объектов привлекла внимание многих исследователей. Хаффман (1971) интересовался в первую очередь формулировкой свойств изображений реальных трехгранных тел, чтобы определять, не показывает ли картинка невоз-

можный, или бессмысленный, объект; наша процедура разметки линий основана прямо на его работе. Альтернативная процедура дана Клоувзом (1971). Простые эвристические правила, которые мы обсуждали, для объединения областей картинки в объекты были придуманы Гузманом (1968); он развил эти простые методы до высокой степени совершенства и построил алгоритм, способный анализировать идеальные картинки, достаточно сложные, чтобы вызвать по крайней мере кратковременное замешательство у человека. Брайс и Феннема (1970) включили простую версию этих правил в программу, использующую области в качестве основного вида данных на протяжении всего анализа сцены. Определение трехмерной структуры по расширенной монокулярной информации было исследовано Фальком (1970), который разработал метод дуальных графов для определения количества необходимой дополнительной информации. В неопубликованном отчете Хорна (1968) обсуждается использование данных фокусировки для определения информации о дальности.

Читатель, видимо, уже заметил, что некоторые методы, обсуждавшиеся в этой главе, в конце концов приводят к некоторому виду комбинаторного поиска. Грамматический разбор представляет собой существенно поисковый процесс; процедура разметки линий использует дерево поиска; и, хотя мы не показали это ясно, метод дуальных графов, анализирующий степени свободы в трехмерной структуре трехгранного тела, также связан с процессом поиска. Задачи комбинаторного поиска такого рода часто возникают в области искусственного интеллекта, и были исследованы общие методы для их эффективного решения. Превосходное введение в этот класс методов дано в монографии Нильсона (1971).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Барроу, Поппльстоун (Barrow H. G., Popplestone R. J.)
Relational descriptions in picture processing, in *Machine Intelligence*, **6**, pp. 377—396, B. Meltzer and D. Michie, eds. (American Elsevier Publishing Co., New York, 1971).

Брайс, Феннема (Brice C. R., Fennema C. L.)
Scene analysis using regions, *Artificial Intelligence*, **1**, № 3, 205—226 (Fall 1970). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», вып. 2, «Мир», М., 1975, стр. 136—159.]

Букнайт (Bouknight W. J.)
A procedure for generation of three-dimensional half-toned computer graphics presentations, *Comm. ACM*, **13**, 527—536 (September 1970).

Гренандер (Grenander U.)
Foundations of pattern analysis, *Quarterly of Applied Math.*, **27**, 2—55 (April 1969).

Гримсдейл (Grimsdale R. L.)
Automatic pattern recognition — new morphological system using a digital computer, *Wireless World*, **65**, 499—501 (November 1959).

Гузман (Guzmán A.)
Decomposition of a visual scene into three-dimensional bodies; *Proc. FJCC*, **33**,

291—304 (1968). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», «Мир», М., 1973, стр. 241—268.]

Дуда, Харт (Duda R. O., Hart P. E.)
Experiments in scene analysis, Proc. First Natl. Symp. Industrial Robots, pp. 119—130 (April 1970).

Кирш (Kirsch R. A.)
Computer interpretation of English text and picture patterns, *IEEE Trans. Elec. Comp.*, EC-13, 363—376 (August 1964).

Клоувз (Clowes M. B.)
On seeing things, *Artificial Intelligence*, 2, № 1, 79—116 (Spring 1971). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», вып. 2, «Мир», М., 1975, стр. 89—135.]

Ледли (Ledley R. S.)
High-speed automatic analysis of biomedical pictures, *Science*, 146, 216—223 (October 9, 1964).

Лоутрел (Loutrel P. P.)
A solution to the hidden-line problem for computer-drawn polyhedra, *IEEE Trans. Comp.*, C-19, 205—213 (March 1970).

Миллер, Шоу (Miller W. F., Shaw A. C.)
Linguistic methods in picture processing — a survey, *Proc. FJCC*, pp. 279—290 (December 1968).

Нарасимхан (Narasimhan R.)
Labelling schemata and syntactic description of pictures, *Information and Control*, 7, 151—179 (June 1964). [Русский перевод в сб. «Автоматический анализ сложных изображений», «Мир», М., 1969, стр. 87—110.]

Нарасимхан (Narasimhan R.)
On the description, generation, and recognition of classes of pictures, in Automatic Interpretation and Classification of Images, pp. 1—42, A. Grasselli, ed. (Academic Press, New York, 1969).

Нильсон (Nilsson N. J.)
Problem-Solving Methods in Artificial Intelligence (McGraw-Hill, New York, 1971). [Русский перевод: Нильсон Н., Искусственный интеллект. Методы поиска решений, «Мир», М., 1973.]

Пфальц, Розенфельд (Pfaltz J. L., Rosenfeld A.)
Web grammars, *Proc. Int. Joint Conf. on Art. Int.*, pp. 609—619, D. E. Walker and L. M. Norton, eds. (May 1969).

Робертс (Roberts L. G.)
Machine perception of three-dimensional solids, in Optical and Electro-Optical Information Processing, pp. 159—197, J. T. Tippet, et al., eds. (MIT Press, Cambridge, Mass., 1965). [Русский перевод в сб. «Интегральные роботы», «Мир», М., 1973, стр. 162—208.]

Уинстон (Winston P.)
Learning structural descriptions from examples, Technical Report MAC TR-76, Project MAC, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (September 1970).

Уорнок (Warnock J. E.)
A hidden-line algorithm for halftone picture representation, Technical Report 4—5, Department of Computer Science, University of Utah, Salt Lake City, Utah (May 1968).

Фальк (Falk G.)
Computer interpretation of imperfect line data as a three-dimensional scene, Stanford Artificial Intelligence Project, Memo AIM-132, Computer Science Department, Stanford University, Stanford, Calif. (August 1970).

Фельдман, Грис (Feldman J., Gries D.)
Translator writing systems, *Comm. ACM*, 11, 77—113 (February 1968). [Русский перевод в сб. «Алгоритмы и алгоритмические языки», вып. 5, ВЦ АН СССР, М., 1971, стр. 105—214.]

Фу, Свайн (Fu K. S., Swain P. H.)

On syntactic pattern recognition, in Software Engineering, Vol. 2, pp. 155—182, J. T. Tou, ed. (Academic Press, New York, 1971).

Хаффман (Huffman D. A.)
Impossible objects as nonsense sentences, in *Machine Intelligence* **6**, pp. 295—323, B. Meltzer and D. Michie, eds. (American Elsevier Publishing Co., New York 1971).

Хорн (Horn B.)
Focusing, Artificial Intelligence Memo № 160, Project MAC, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts (May 1968).

Шоу (Shaw A. C.)
A formal picture description scheme as a basis for picture processing systems, *Information and Control*, **14**, 9—52 (1969).

Шоу, Алан (Shaw A. C., Alan C.)
Parsing of graph—representable pictures, *J. ACM*, **17**, 453—481 (July 1970).

Эванс (Evans T. G.)
Grammatical inference techniques in pattern analysis, in Software Engineering, Vol 2, pp. 183—202, J. T. Tou, ed. (Academic Press, New York, 1971).

Эрли (Earley J.)
An efficient context-free parsing algorithm, *Comm. ACM*, **13**, 94—102 (February 1970).

Задачи

1. Построив дерево грамматического разбора, покажите, что *aabba* не является предложением языка, грамматика которого обсуждалась в разд. 12.2.

2. Используя подход, основанный на стандартных точках притяжения, постройте грамматику, язык которой включает по крайней мере три различных контурных рисунка куба.

3. Придумайте решающее правило для определения, связаны ли два произвольных неперекрывающихся объекта отношением слева/справа. Правило должно давать решения, соответствующие человеческому здравому смыслу, и не должно быть слишком простым, таким, например, что для выполнения отношения потребовалось бы, чтобы один объект находился полностью слева от другого. Придумайте другое решающее правило для определения, связаны ли объекты отношением сверху/снизу. Идентичны ли эти правила во всем, за исключением изменения в ориентации на 90°?

4. Разработайте алгоритм для определения по картинке, связаны ли два многогранника отношением поддерживает/поддерживается.

5. Найдите матрицу S размерностью 4×4, которая масштабирует каждую компоненту трехмерного вектора $\mathbf{v}$ в произвольное число раз. (Мы полагаем, что вектор $\mathbf{v}$ сначала преобразуется в однородную форму $\tilde{\mathbf{v}}$ и что произведение $S\tilde{\mathbf{v}}$ преобразуется снова в обычные координаты.) Покажите, как можно использовать матрицу S, чтобы единственная модель куба служила моделью произвольного прямоугольного параллелепипеда.

6. Выведите формулы (1) и (2), дающие решение задачи подбора модели по минимуму среднеквадратичной ошибки.

7. Постройте в общих чертах алгоритм для решения проблемы невидимых линий. Можно ли существенно упростить алгоритм, если он должен применяться только к картинкам многогранников? к изображениям прямоугольных тел?

8. Начертите несколько трехгранных тел, чтобы продемонстрировать все типы вершин каталога рис. 12.9. Пометьте каждую вершину указателем ее типа

по каталогу и пометьте каждую линию плюсом, минусом или должным образом ориентированной стрелкой.

9. Постройте дерево поиска для каждого из тел, начерченных в предыдущей задаче. Задайте хорошее эвристическое правило выбора порядка, в котором должны осматриваться вершины.

10. Почему не может быть вершин типов 2, 4, 6 или 8?

11. Начертите сцену, которая изображает по крайней мере четыре многогранных объекта и содержит по крайней мере одну вершину типа «*X*» и по крайней мере одну пару согласованных вершин типа «*T*». Объедините области сцены в объекты, используя эвристический метод, описанный в данной главе. (Используйте либо правило 1, либо правило 1′ по вашему выбору.)

12. Начертите сцену с многогранными объектами, для которой эвристические правила, обсуждавшиеся в этой главе, объединяют области в объекты неправдоподобно. Предложите модификации и дополнения к правилам, чтобы улучшить их действие. Вы должны рассматривать модификации как правил введения связей между областями, так и правил объединения областей.

13. Нарисуйте дуальный граф многогранника рис. 12.10, *г* и проанализируйте его сливаемость. (Считайте, что объект представляет собой единый многогранник.)

14. Начертите трехгранное тело, содержащее по крайней мере одно «отверстие». Проанализируйте его сливаемость. Постройте дерево поиска, необходимое для разметки вершин тела, и посмотрите, существует ли здесь более чем одна совместимая интерпретация.

15. Можно ли распространить интерпретацию посредством дуального графа на многогранники степени большей чем 3, и если можно, то каким образом?

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абенд (Abend K.) 48, 91, 138
Абрамсон (Abramson N.) 89
Августсон (Augustson J. G.) 272
Агмон (Agmon S.) 202
Агреула (Agrawala A.) 18, 270
Айзерман М. А. 203
Албрехт (Albrecht R.) 47
Альт (Alt F.) 401
Андерсон (Anderson E.) 239
Андерсон (Anderson T. W.) 47, 48, 200
Аоки (Aoki M.) 90
Аркадьев А. Г. 138
Атрубин (Atrubin A. J.) 271
Аттнив (Attneave F.) 363, 399

Байснер (Beisner H. M.) 89
Барни (Barnea D. I.) 315
Барроу (Barrow H. G.) 403
Барус (Barus C.) 137
Бахадур (Bahadur K. K.) 48, 138, 200
Башкиров О. А. 203
Бейли (Baily D. E.) 273
Блайдон (Blaydon C. C.) 138, 203
Блекуэлл (Blackwell D.) 47
Блок (Bloch H. D.) 201
Блюм (Blum M.) 400
Болл (Ball G. H.) 270, 271, 272, 401
Большев Л. Н. 270
Бонгард М. М. 18
Боннер (Bonner R. E.) 272
Браверман (Braverman D.) 89, 203
Браверман Э. М. 138, 202
Брайан (Bryan J. G.) 138
Брайс (Brice C. K.) 315, 494
Браун (Brown D. T.) 138
Брилл (Brill E. L.) 389, 390, 401
Бриигхэм (Bringham E. O.) 345
Бродац (Brodatz P.) 315
Брэйсвелл (Bracewell R. N.) 344
Букнайт (Bouknight W. J.) 430, 493
Бутц (Butz A. R.) 201

Вагнер (Wagner T. J.) 137
Вазан (Wasan M. T.) 203
Вальд (Wald A.) 47, 49
Ван дер Люгт (Vander Lugt) 345
Ватанабе (Watanabe M. S.) 18, 270, 271
Ватсон (Watson G. S.) 137
Вендт (Wendt P. H.) 203
Вернер (Werner T. J.) 47
Ви (Wee W. G.) 204
Виндроу (Widrow B.) 202
Вильямс (Williams W. T.) 271, 281
Вишарт (Wishart D.) 239, 271
Возенкрафт (Wozenkraft J. M.) 346
Вольф (Wolfe J. H.) 269, 272
Вомак (Womach B. F.) 202

Гардер (Garder L.) 399
Гасс (Gass S. I.) 202
Гиббонс (Gibbons J. D.) 136
Гибсон (Gibson J. J.) 315
Гиршик (Girshick M. A.) 47
Гласс (Glass J. M.) 399
Гликсман (Glieksman A. M.) 202
Говер (Gower J. C.) 271
Голэй (Golay M. J. E.) 314
Гоус (Gose E.) 18
Гош (Ghosh S. K.) 430
Грауштейн (Graustein W. C.) 429, 452
Грегори (Gregory R. L.) 314, 430
Грей (Gray S. B.) 400
Гренандер (Grenander U.) 493
Гримсдейл (Grimsdale R. L.) 493
Грин (Green D. M.) 48, 273
Грин (Green P. E.) 272
Гриннас (Greanias E. C.) 315, 399
Гринолд (Grinold R. C.) 202
Грис (Gries D.) 493
Гриффит (Griffith A. K.) 315
Гронер (Groner G. F.) 202
Грэхем (Graham C. H.) 314
Гудмэн (Goodman J. W.) 321, 344, 345
Гузман (Guzmán A.) 315
Гюйо (Guiho G.) 314

Дамман (Damman J. E.) 272
Данциг (Dantzig G. B.) 202
Дёч (Doetsch G.) 269
Джайнес (Jaynes E. T.) 89
Джентльмен (Gentleman W. M.) 345

Джонс (Jones J. W.) 48
Джонс (Jones K. L.) 270
Джонсон (Johnson S. C.) 271
Джэкобс (Jakobs I. M.) 346
Диннин (Dinnean G. P.) 314
Динштейн (Dinstein I.) 272
Дойль (Doyle W.) 314
Дорофеюк А. А. 270
Дуда (Duda R. O.) 201, 399, 403
Дынкин Е. Б. 90
Дэйли (Daly K. F.) 269

Зубин (Zubin J.) 270

Иден (Eden M.) 293
Ингрэм (Ingram M.) 294
Ито (Ito T.) 138
Йа (Yau S. S.) 203, 204

Казмирчак (Kazmirczak H.) 48
Какоулос (Cacoullos T.) 137
Камфёфнер (Kamphoefner F. J.) 203
Кармон (Carmone F. J.) 272
Каутц (Kautz W. H.) 271
Кашьяп (Kashyap R. L.) 138, 202, 203
Квешенберри (Quesenberry C. P.) 137
Кейзи (Cassey R. G.) 271
Келли (Kelly G. L.) 272, 315
Келли (Kelly M. D.) 316
Кенал (Kanal N.) 48, 90, 91, 138, 313, 314
Кендал (Kendall M. G.) 401
Кессель (Kessell D. L.)
Кин (Keehn D. G.) 89
Кинг (King B. F.) 273
Кирш (Kirsch R. A.) 493
Клеменс (Clemens J. K.) 315, 400
Клоувз (Clowes M. B.) 494
Ковер (Cover T. M.) 90, 137, 269
Коксетер (Coxeter M. S. M.) 429
Колверт (Calvert T. W.) 272
Колерс (Kolers P. A.) 18, 313
Коралуппи (Coraluppi G.) 270
Корнсвит (Cornsweet T. N.) 314
Костелло (Costello J. P.) 270
Кофорд (Koford J. S.) 202
Кронмел (Kronmal R. A.) 138
Крускал (Kruskal J. B.) 272
Кудрявцев В. Н. 451
Кули (Cooley J. W.) 345
Кульбак (Kuliback S.) 138
Кунс (Kuhns J. I.) 272
Кунс (Coons S. A.) 430
Кунц (Koontz) 271

Купер (Cooper D. B.) 270
Купер (Cooper P. W.) 48, 269, 270

Ланс (Lance G. N.) 271, 281
Лахенбрук (Lachenbruck P. A.) 91
Левади (Levadi W. S.) 204
Левайн (Levine M. D.) 18, 399
Левин (Levin S. A.) 201
Ледли (Ledly R. S.) 314, 316, 493
Лейниотис (Lainiotis D. G.) 47, 89, 270
Леман (Lehman E. L.) 90
Лендэрис (Lendaris G. G.) 273
Ли (Lee R. C. T.) 49
Лидбеттер (Leadbetter M. R.) 137
Лин (Ling R. F.) 272
Липкин (Lipkin B. S.) 317
Лоутрел (Loutrel P. P.) 430, 493
Лофтсгарден (Loftsgaarden D. O.) 137
Льюис (Lewis P. M.) 138
Льюс (Luce R. D.) 47
Лю (Liu C. N.) 138

Маккалок (McCulloch W. S.) 200
Маккуин (Mac Queen J.) 271
Мангасарян (Mangasarian O. L.) 201, 202
Мансон (Munson J. H.) 315, 400
Матсон (Mattson R. L.) 138, 202, 272
Меджисси (Medgyessy P.) 269
Мейзел (Meisel W. S.) 138, 273
Мейс (Mays C. H.) 202
Мейсон (Mason S. J.) 315, 400
Мёрти (Murthy W. K.) 137
Миккей (Mickey M. R.) 91
Миллер (Miller R. G.) 273
Миллер (Miller W. F.) 493
Минкер (Minker J.) 272
Минник (Minnick R. C.) 202
Минский (Minsky M.) 18, 48, 201, 400
Митра (Mitra S. K.) 203
Мозес (Moses L. E.) 47
Мондс (Monds F. C.) 270
Монтанари (Montanary U.) 387, 399, 400
Моргенштерн (Morgenstern O.) 47
Морен (Moran P. A. P.) 401
Морроу (Morrow R. E.) 345
Моцкин (Motzkin T. S.) 202
Мучник И. Б. 203
Мэрилл (Marill T.) 48, 273

Надь (Nagy G.) 18, 271
Найноу (Nienow W. C.) 273
Нарасимхан (Narasimhan R.) 493

Натан (Nathan R.) 345
фон Нейман (von Neumann J.) 47
Нейман (Neyman J.) 47, 89
Нильсон (Nilsson N. J.) 18, 47, 48, 201, 204, 399
Новиков (Novikoff A. B. J.) 201, 401

Оллейс (Allais D. C.) 90
Оппенхейм (Oppenheim A. V.) 345
Оре (Ore O.) 253

Папулис (Papoulis A.) 344, 346
Парзен (Parzen E.) 136
Парк (Park S. K.) 47
Патрик (Patrick E. A.) 270, 273
Паттерсон (Patterson J. D.) 202
Пейперт (Papert S.) 201, 371, 400
Петерсон (Peterson D. W.) 138
Пиз (Pease M. C.) 345
Пингл (Pingle K. K.) 316
Пиренн (Pirenne M. H.) 430
Пирсон (Pearson E. S.) 47
Пирсон (Pearson K.) 269
Писке (Piske U. A. W.) 204
Питтс (Pitts W. H.) 201
Пойа (Pólya G.) 400
Попельбаум (Poppelbaum W. J.) 345
Поппльстоун (Popplestone R. J.) 493
Престон (Preston K.) 314
Прим (Prim R. C.) 271
Пфальц (Pfaltz J. L.) 400, 493

Равив (Raviv J.) 48
Райзман (Riseman E. M.) 48
Райфа (Raiffa H.) 47
Рао (Rao C. R.) 203
Растригин Л. А. 452
Рендал (Randal N. C.) 90, 315, 319
Ридгуэй (Ridgway W. C.) 201
Робертс (Roberts L. G.) 204, 314, 315, 421, 430, 493
Розенблатт (Rosenblatt F.) 159
Розенблатт (Rosenblatt M.) 136
Розенфельд (Rosenfeld A.) 18, 19, 313, 315, 345, 399, 400, 493
Розоноэр Л. И. 203
Роскис (Roskies K. Z.) 401
Росс (Ross G. J. S.) 271
Рубин (Rubin J.) 270

Саммон (Sammon J. W., Jr.) 265, 266, 272, 273
Свайн (Swain P. H.) 493
Себестьян (Sebestyen G. S.) 137, 271
Сегё (Szego) 400
Селзер (Selzer R. H.) 345
Селфридж (Selfridge O. G.) 201
Сильверман (Silverman H. F.) 315
Симон (Simon J. C.) 314
Синглтон (Singleton K. C.) 201, 271, 345
Скланский (Sklansky J.) 400
Скотт (Scott R. W.) 137
Слейгл (Slagle J. R.) 49
Смит (Smith F. W.) 202, 204
Сниф (Sneath P. H.) 270
Собел (Sobel I.) 291, 430
Сокаль (Sokal R. R.) 270
Спешт (Specht D. F.) 138
Спреджинс (Spragins J. D.) 90, 269, 270
Стейнат (Stanat D. F.) 269
Стивенс (Stevens M. E.) 18
Стивенс (Stevens S. S.) 270
Стип (Steppe J. A.) 401
Стэнли (Stanley G. L.) 273, 346
Сэвидж (Savage L. J.) 89
Сэкрисон (Sakrison D. J.) 346
Сэнд (Sande G.) 345

Тайдмен (Tideman D. V.) 138
Тартер (Tarter M. E.) 138
Тацуока (Tatsnoka M. M.) 138
Теппинг (Tepping B.) 272
Типпет (Tippett J. T.) 313, 345
Томас (Thomas J. B.) 136
Торндайк (Thorndike K. L.) 270
Трайон (Tryon R. C.) 270, 273
Третьяк (Tretiak O. J.) 18
Тэйчер (Teicher H.) 269
Тэрстон (Thurston M.) 315
Тьюки (Tukey J. W.) 345

Уайлд (Wilde D. G.) 203
Уилкс (Wilks S. S.) 89, 135, 399
Уиндер (Winder R. O.) 48, 201
Уинстон (Winston P.) 493
Уонг (Wong E.) 401
Уорнок (Warnock J. E.) 430, 493
Ур (Uhr L.) 313

Фальк (Falk G.) 494
Федер (Feder J.) 399
Феллер (Feller W.) 247
Фельдман (Feldman J.) 493
Феннема (Fennema C. L.) 305, 307, 315, 494

Фергюсон (Ferguson T. S.) 47
Фикс (Fix E.) 136, 137
Фиш (Fisz M.) 136
Фишер (Fischer G. L., Jr.) 313
Фишер (Fisher R. A.) 47, 89, 90, 138, 200, 239
Фишлер (Fischler M. A.) 399
Флеш (Fleiss J. L.) 270
Форджи (Forgey E. W.) 239
Форсен (Forsen G. E.) 314, 399
Фоссум (Fossum H.) 201
Фрелик (Fralick S. C.) 137, 270
Фридман (Friedman H. P.) 270
Фримэн (Freeman H.) 399
Фу (Fu K. S.) 49, 89, 203, 493
Фукунага (Fukunaga K.) 91, 271

Хайлиман (Highleyman W. H.) 88, 91, 200, 315
Харли (Harley T. J.) 48, 90, 91, 138
Харт (Hart P. E.) 137, 399, 430, 493
Хартиган (Hartigan J. A.) 272
Хаффман (Huffman D. A.) 493
Хеллман (Hellman M. E.) 137
Хендерсон (Henderson A.) 202
Хеикок (Hancock J. C.) 270
Хесселблад (Hasselblad V.) 269
Хо (Ho Y. C.) 18, 202, 203
Ходжес (Hodges J. L., Jr.) 136, 137
Ходс (Hodes L.) 400
Хокинс (Hawkins J. K.) 18, 201
Холкомб (Holcomb R. L.) 138
Холл (Hall D. J.) 271, 272
Холмс (Holmes W. S.) 346
Хорн (Horn B.) 494
Хоул (Hoel P. G.) 89
Хофф (Hoff M. E.) 202
Хох (Hough P. V. C.) 399
Ху (Hu K. C.) 271
Ху (Hu M. K.) 401
Хуанг (Huang T. S.) 18, 314
Хуге (Hughes G. F.) 84, 90, 91
Хьюбель (Hubel D. H.) 315
Хьюит (Hewitt C.) 400
Хэрэлик (Haralick R. M.) 272

Цань (Zahn C. T.) 259, 272, 316, 399, 401
Цыпкин Я. З. 138, 203

Ча (Chu J. T.) 47
Чандрасекаран (Chandrasekaran B.) 90, 91
Чаплин (Chaplin W. G.) 204
Чарнс (Charnes A.) 202
Чен (Chen C. H.) 89
Ченг (Cheng G. C.) 313, 314
Чернов (Chernoff H.) 47
Чин (Chien Y. T.) 89
Чоу (Chow C. K.) 47, 48, 138
Чуи (Chueh J. C.) 47

Шепард (Shepard R. N.) 272
Шёнберг (Schoenberg I. J.) 202
Шоу (Shaw A. C.) 493
Шрайбер (Schreiber W. F.) 18
Штейнбух (Steinbuch K.) 48, 204
Шумперт (Schumpert J. M.) 203, 204

Эванс (Evans T. G.) 493
Эди (Edie J. L.) 137
Эзилтайн (Aseltine J. A.) 344
Эйгуя (Ahuja D. V.) 430
Элдридж (Eldridge K. R.) 203
Эльбур Р. Э. 452
Эндрюс (Andrews D. R.) 271, 344, 346
Эрих (Erich R. W.) 49
Эрли (Earley J.) 493
Эфрон (Efron B.) 201

Юлеш (Julesz B.) 430
Юранс В. 452

Якович (Yakowitz S. J.) 269
Янг (Joung T. Y.) 270
Ярбус А. Л. 314

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

автокорреляционная функция 341
агломеративная иерархическая группировка 251
агломеративные процедуры 251
алгоритм «ближайший сосед» (nearest-neighbor) 253
— градиентного спуска 162, 165
— «дальний сосед» (furthest-neighbor) 254
— единичной связи
— максимума 254
— минимума 254
— полных связей 254
— Хо — Кашьяпа 179
анализ главных компонент 267
— областей 304
анализирующий режим 456
аналитические описания формы 387
аналоговая функция интенсивности 255
ангармоническое (сложное, двойное) отношение (anharmonic (cross) ratio) 435
апостериорная вероятность 22
аппроксимация для бинариого случая 122
— посредством моментов 390
— путем разложения в ряд 119
априорная вероятность 20
асимптотическое приближение к оптимальному дискриминанту 172

база координатной системы 439
базисное допустимое решение 187
базовый вектор (baseline vector) 486
байесовская теория решенй 42
байесовский классификатор 60, 225
— рнск 25
байесовское обучение 56, 65, 69
— — без учителя 226
— решающее правило 23, 25
бинарное изображение 294

вектор базовый 426
— признаков 13, 24
— решения 155
— среднего значения 33
— цен 186
величина порога 146
вероятность апостериорная 22
— апрнорная 20
— ошибки средняя 84
— — усредненная по задачам 84
весовой вектор 146
весовое пространство 155
взаимная спектральная плотность 341
взятие градиента 289
— отсчетов (sampling) 284
винеровский фильтр 343
воспроизводящая плотность 64
выборки, классифицируемые с ошибкой 157
выборочная ковариационная матрица 60
выборочное среднее 58, 64
выборочный риск 145
выделение контуров 289
выделитель признаков 12
выпуклая оболочка 208, 377
выпуклость 373
высокочастотная пространственная фильтрация 330

гипергиперболоид 150
гиперквадрнка 41, 150
гиперплоскость 146
гиперсфера 150
гиперэллипсоид 150
гипотеза об опоре 421
гистерезнсное сглаживание 379
главные компоненты 235
главный луч 406
глобальная (мировая) система координат 414
глобальный эталон 300
гомеоморфизм 367
градиентное изображение 289
градиентный метод подъема 217
грамматика 455
— сетей 493
грамматический разбор 457
границы областей решений 28
— ошибки 115
граф дуальный 490
— направленный 465
— 1-сливаемый 492
— k-сливаемый 492

граф подобия 259
графы отношений 463

двумерное описание сцены 465
делимые процедуры 251
дендрограмма 250
дерево 253
— грамматического разбора 458
— зависимости 129
— покрывающее 253
— — минимальное 253
— результирующее 253
дефицит выпуклости (convex deficiency) 378
диаметр группы 255
диаметральный путь 260
дискретная функция интенсивности (digital picture function) 285
дисперсия 33
дихотомия 81
— линейная 81
догматизм 61
допуск (margin) 155
допустимое решение 186
достаточные статистики 70, 71
дуги дерева 463
дыра в сети (hole) 368

единичная точка 439
емкость гиперплоскости 82
— разделяющей плоскости 81
естественное уравнение кривой 363

задача второго ракурса 434
— отделения объекта от фона 350
зазор гистерезиса 380

идентифицируемая плотность 69, 212
иерархическая группировка (hierarchical clustering) 250
изображение бинарное 294
импульсная реакция 330
инвариантность 395
инвариантные критерии 244
— описания 366
интегральные геометрические описания 393
интерполяция 101
искусственная переменная 186
испытания по тренировочным данным 87
итеративный подбор концевых точек 362

калибровка камеры 420
квадратичная разделяющая функция 150
квазипроективные признаки 442
квантование 284
классификатор 13
— байесовский 60, 225
— по минимуму расстояния 37
кластер 34
кластерный анализ (группировка) (clustering) 211, 233
ковариационная матрица 33
— — выборочная 60
кодирование цепное 364
компоненты главные 235
— связанные 259
— связные 367
конструктивные выборки 55, 86
контекст 45
контрольные выборки 86
коррекция по одной выборке 159
коэффициент Бхаттачария 51
критерий минимума дисперсии 241
— рассеяния 242
— суммы квадратов ошибок 239
кусочно линейная машина 208

линейная машина 37, 148
— разделяющая функция 37, 146
линейно разделяемые выборки 153
линейное свойство объекта 370
линейный дискриминант Фишера 131 129
— пространственный фильтр 329
линия горизонта 423
логическое сглаживание 295
— усреднение 295
локальные экстремумы границы объекта 379
локальный эталон 300

максимальный полный подграф 259
матрица корреляций 267
— подобия 258
— разброса 131
— — внутри класса 131
— — между классами 131
— рассеяния 242
— — внутри группы 242
— — i-й группы 242
— — между группами 242
махаланобисово расстояние 34
машина кусочно линейная 208
— линейная 37
метод градиентного спуска 156

метод Кесслера 195
— подъема градиентный 217
— потенциальных функций 192
— степного пожара 382
методы стохастической аппроксимации 175
H-метод 91
U-метод 91
метрика 257, 374
— абсолютного значения 374
— максимального значения 374
меры подобия 235
минимальная квадратичная ошибка 168
минимизация персептронной функции критерия 187
многомерное масштабирование 264
многоугольные сети 368
множественный дискриминантный анализ 133
моменты центральные 392
монокулярные определение трехмерной структуры

недорелаксация 165
неравенство ультраметрическое 258
несовместимое ребро 260
нетерминальные символы 456
низкочастотная пространственная фильтрация 330
нормальная плотность 32
— — одномерная 33
— — многомерная 33
— система параметров прямой линии 359
нормированная функция взаимной корреляции 299
нормированные цветовые координаты 309
нулевая гипотеза 262

области решений 30, 155
обобщение метода наименьших квадратов 198
обобщенные разделяющие функции 149
обратное преобразование перспективное 410
— — Фурье 319
обучение байесовское 56, 65, 69
— без учителя (unsupervised learning) 56
— — — байесовское 226
— вектору параметров 226
— среднему значению 63
— с учителем (supervised learning) 56
общая матрица рассеяния 243
общее расположение точек 81
общий средний вектор 242
объединение областей в объекты 480
объект 294
ограничение по диаметру 370
— — порядку 370
однородные координаты 408
описание более информативное 366
— формы 365
опорный треугольник 439
определение положения объекта 420
определитель в качестве критерия 244
оптическая ось 406
отказ от принятия решения 51
отношение ангармоническое 435
— аспекта 376
— правдоподобия 26
— толщины 376
отображение топологическое 367
оценка апостериорных вероятностей 110
— байесовская 55
— ковариационной матрицы 79
— методом k_n-ближайших соседей 108
— параметров 55
— плотности распределения 99
— по максимуму правдоподобия 55, 57, 214
— уровня ошибки 86

парадокс Бертрана 393
параметры смеси 212
парзеновские окна 101
передаточная функция линейного пространственного фильтра 329
перекрестный оператор Робертса 288
переменное приращение 162
перерелаксация 165
персептронная функция критерия 157
перспективное преобразование 405
— соответствие 436
плотность взаимная спектральная 341
— воспроизводящая 64
— идентифицируемая 69, 212
— компонент 212
— распределения условная 21
— — — по классу 61
— смеси 212
поверхность сети (face) 368
— решений 146
повышение резкости 289
подбор линии по минимуму суммы квадратов ошибки (МСКО) 351
— — по собственному вектору 355
— — посредством кластерного анализа 359

полиномиальные разделяющие функции 120, 150
полиномы Радемахера — Уолша 123
полная матрица разброса 133
полностью линейно разделяемые выборки 208
полный вектор средних значений 133
— подграф 254
— — максимальный 259
попарно линейно разделяемые выборки 208
порождающий режим 456
последовательная составная задача принятия решений 45
потенциальная функция 192
пошаговая оптимальная иерархическая группировка 256
поштучное исключение 88, 91
правдоподобие 23, 26, 57
правила подстановок (порождающие) 456
правило Байеса 22
— ближайшего соседа 111
— k-ближайших соседей 117
— Видроу — Хоффа 174
— минимизации уровня ошибки 27
— постоянного приращения 159
— релаксаций 165
— решающее 21
предложение 456
преобразование к средним осям 382
— точек в кривые 359
— Фурье 329
приближение по собственному вектору 355
принцип максимума энтропии 89
принятие направленных решений 232
проблема невидимых линий 471
проективное соответствие 436
проективные инварианты 433, 438
— координаты 439
проекция 406
проклятие размерности 108, 152
прослеживание контуров 311
пространственное дифференцирование 289
пространственные частоты 320
пространственный период 321
пространство параметров 359
процедура Видроу — Хоффа 173, 190
— восхождения на вершину 217
— градиентного спуска модифицированная 178
— группировки (кластерная процедура) 234
— линейного программирования 191
— псевдообращения 191
процедура релаксаций 190
— с переменным приращением 190
— — постоянным приращением 190
— Хо — Кашьяпа 191
процедуры агломеративные 251
— коррекции ошибок 167
— линейного программирования 185
— минимизации квадратичной ошибки 168
— релаксаций 164
— спуска 178, 190
— стохастической аппроксимации 177, 190
прямое перспективное преобразование 408
псевдообращение матриц 170, 353
пучок 435

разброс внутри класса 131
разделение с минимальной дисперсией 239
разделяющая функция (discriminant function) 28
— — квадратичная 150
— — линейная 37
— — — обобщенная 150
— — полиномиальная 120, 150
разделяющий вектор 155
разложение Бахадура — Лазарсфельда 125, 127
— естественной функции 388
— Радемахера — Уолша 122
— Чоу 127, 128
рандомизированное правило 52
распознаватели первичных элементов 461
распределение бета 77
— Бернулли 77
— биномиальное 77
— гамма 77
— Максвелла 76
— нормальное 76
— полиномиальное 76
— Пуассона 77
— Рэлея 76
— экспоненциальное 76
расстояние 236, 257
регуляризация функции 293
рекурсивный байесовский подход 69
решающее правило 25
— — байесовское 23, 25
решение допустимое базисное 187
риск 25
— байесовский 25
— выборочный 145
— условный 25
ряд точек 435

свертка 104, 327
связная область элементарная 305
связные компоненты 259, 367
сегментация линии 361
семантика линии 361
сечение пучка 436
симметричная функция потерь 27
симплекс-метод 186
синтаксически неоднозначная структура 457
синтаксический (лингвистический) структурный подход 456
система координат изображения 414
скелет 382
скелетная пара объекта 384
след в качестве критерия 243
сложное отношение 437
сопряженные точки схода (conjugate vanishing points) 425
составная задача принятия решений 45
состояние природы 20
спектр Фурье 319
спектральная плотность мощности функций 341
сравнение с эталоном 37, 296
среднее значение 33
— — скользящее 293
— — текущее 293
средний вектор i-й группы 242
среднеквадратичная оценка 340
— сходимость 103
степень различия 257
стереоскопия 425
сходимость дисперсии 104
— среднего значения 103

теорема о свертке 328
— — сдвиге 327
— сходимости персептрона 159
— факторизации 71
терминальные (первичные) символы 456
топологические свойства множества 367
топологическое отображение 367
точка вертикального схода (vertical vanishing point) 422
— горизонтального схода (horizon vanishing point) 424
— изображения (картинки) 406
— объекта 406
точки гашения 382
— максимальной кривизны 363
— схода сопряженные 425
трехгранные тела 472
трехмерное описание сцены 465
триангуляционное уравнение (уравнение стереоскопии) 427

угловая естественная функция 390
удержание (holdout) 91
ультраметрическое неравенство 258
уравнение в естественных координатах 363
— триангуляционное (стереоскопии) 427
уровень ошибки 27, 83
— — байесовский 83
— — для правила ближайшего соседа 114
— — усредненный по задачам 82
— полутонов 284
условная плотность распределения 21
условный риск 25

факторный анализ 267
фильтрация высокочастотная пространственная 330
— низкочастотная пространственная 330
фон 294
формула Эйлера 368
функции-предикаты 369
функция автокорреляционная 341
— взаимной корреляции 299, 341
— — — нормированная 299
— — — цепная 364
— гашения скелета 383
— интенсивности (picture function) 283
— интенсивности аналоговая 283
— — дискретная 285
— критерия 131
— линейного пространственного фильтра 329
— объекта характеристическая 387
— ограниченная по полосе частот 323
— окна 101
— подобия 237
— потенциальная 192
— персептрона 157
— порождающая моменты 391
— потерь симметричная 27
— рассеяния точки 330
— регрессионная 177
— решающая 25
— целевая 186
— четности 208

цветовые составляющие 308
целевая функция 186
целенаправленность 462
центр проекции 406
— пучка 435
центральное проектирование 406

центральные моменты 392
цепное кодирование 364

ширина окна 102
— полосы частот 324

Эйлера формула 368
— число 368

экспоненциальное распределение 75, 76
элементарная связная область 305
энергия изображения 299
эталон глобальный 300
— локальный 300

ядро плотности 73
язык 456
яркость 284

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора перевода 5

Предисловие 7

Часть I. **Классификация образов** 11

Глава 1. **Введение** 11

1.1. Машинное восприятие 11
1.2. Пример 12
1.3. Модель классификации 14
1.4. Описательный подход 15
1.5. Обзор содержания книги по главам 17
1.6. Библиографические сведения 18
Список литературы 18

Глава 2. **Байесовская теория решений** 20

2.1. Введение 20
2.2. Байесовская теория решений — непрерывный случай 23
2.3. Классификация в случае двух классов 26
2.4. Классификация с минимальным уровнем ошибки 27
2.5. Классификаторы, разделяющие функции и поверхности решений 28
2.6. Вероятности ошибок и интегралы ошибок 31
2.7. Нормальная плотность 32
2.8. Разделяющие функции для случая нормальной плотности . . . 36
2.9. Байесовская теория решений — дискретный случай 42
2.10. Независимые бинарные признаки 43
2.11. Составная байесовская задача принятия решений и контекст . 44
2.12. Примечания 46
2.13. Библиографические и исторнческие сведения 47
Список литературы 49
Задачи 51

Глава 3. **Оценка параметров и обучение с учителем** 55

3.1. Оценка параметров и обучение с учителем 55
3.2. Оценка по максимуму правдоподобия 56
3.3. Байесовский классификатор 60
3.4. Обучение при восстановлении среднего значения нормальной плотности 63
3.5. Байесовское обучение в общем случае 68
3.6. Достаточные статистики 70
3.7. Достаточные статистики и семейство экспоненциальных функций 74
3.8. Проблемы размерности 78
3.9. Оценка уровня ошибки 86
3.10. Библиографические и исторические сведения 89
Список литературы 91
Задачи 93

Глава 4. Непараметрические методы 98

4.1. Введение 98
4.2. Оценка плотности распределения 98
4.3. Парзеновские окна 101
4.4. Оценка методом k_n ближайших соседей 108
4.5. Оценка апостериорных вероятностей 110
4.6. Правило ближайшего соседа 111
4.7. Правило k ближайших соседей 117
4.8. Аппроксимации путем разложения в ряд 119
4.9. Аппроксимация для бинарного случая 122
4.10. Линейный дискриминант Фишера 129
4.11. Множественный дискриминантный анализ 133
4.12. Библиографические и исторические сведения 136
Список литературы 139
Задачи 141

Глава 5. Линейные разделяющие функции 145

5.1. Введение 145
5.2. Линейные разделяющие функции и поверхности решений . . . 146
5.3. Обобщенные линейные разделяющие функции 149
5.4. Случай двух линейно разделимых классов 153
5.5. Минимизация персептронной функции критерия 157
5.6. Процедуры релаксаций 164
5.7. Поведение процедур в случае неразделяемых множеств. . . . 167
5.8. Процедуры минимизации квадратичной ошибки 168
5.9. Процедуры Хо — Кашьяпа 178
5.10. Процедуры линейного программирования 185
5.11. Метод потенциальных функций 192
5.12. Обобщения для случая многих классов 195
5.13. Библиографические и исторические сведения 200
Список литературы 204
Задачи 207

Глава 6. Обучение без учителя и группировка 211

6.1. Введение 211
6.2. Плотность смеси и идентифицируемость 212
6.3. Оценки по максимуму правдоподобия 213
6.4. Приложение к случаю нормальных смесей 215
6.5. Байесовское обучение без учителя 224
6.6. Описание данных и группировка 233
6.7. Меры подобия 234
6.8. Функции критериев для группировки 238
6.9. Итеративная оптимизация 247
6.10. Иерархическая группировка 249
6.11. Методы, использующие теорию графов 258
6.12. Проблема обоснованности. 261
6.13. Представление данных в пространстве меньшей размерности и многомерное масштабирование 263
6.14. Группировка и уменьшение размерности 267
6.15. Библиографические и исторические сведения 269
Список литературы 273
Задачи 277

Часть II. **Анализ сцеи** 282

Глава 7. **Представление изображений и их первоначальные упрощения** 282

7.1. Введенне 282
7.2. Представление информации 283
7.3. Пространственное дифференцирование 287
7.4. Пространственное сглаживание 291
7.5. Сравнение с эталоном 296
7.6. Анализ областей 304
7.7. Прослеживание контуров 310
7.8. Библиографические и исторические сведения 313
Список литературы 316
Задачи 318

Глава 8. **Анализ пространственных частот** 319

8.1. Введение 319
8.2. Теорема отсчетов 323
8.3. Сравнение с эталоном и теорема о свертке 326
8.4. Пространственная фильтрация 329
8.5. Среднеквадратичная оценка 340
8.6. Библиографические и исторические сведения 344
Список литературы 346
Задачи 348

Глава 9. **Описания линии и формы** 350

9.1. Введение 350
9.2. Описание линии 351
9.3. Описание формы 365
9.4. Библиографические и исторические сведения 398
Список литературы 401
Задачи 403

Глава 10. **Перспективные преобразования** 405

10.1. Введение 405
10.2. Моделирование процесса съемки изображения 405
10.3. Перспективное преобразование в однородных координатах . . 408
10.4. Перспективные преобразования с двумя системами отсчета . . 413
10.5. Примеры применения 419
10.6. Стереоскопическое восприятие 425
10.7. Библиографические и исторические сведения 429
Список литературы 431
Задачи 431

Глава 11. **Проективные инварианты** 433

11.1. Введение 433
11.2. Сложное отношение 435
11.3. Двумерные проективные координаты 439
11.4. Линия, соединяющая объективы 442
11.5. Аппроксимация ортогональным проектированием 446
11.6. Восстановление объекта 449
11.7. Библиографнческне и исторические сведения 451

Список литературы 452
Задачи 452

Глава 12. **Методы составления и обработки описаний в анализе сцен** . 454

12.1. Введение 454
12.2. Формальное представление описаний 455
12.3. Трехмерные модели 465
12.4. Анализ многогранников 471
12.5. Библиографические и исторические сведения 493
Список литературы 494
Задачи 496

Именной указатель 498
Предметный указатель 502

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Ваши замечания о содержании книги, ее оформлении, качестве перевода и другие просим присылать по адресу: 129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., д. 2, издательство «Мир».

Р. Дуда, П. Харт
РАСПОЗНАВАНИЕ ОБРАЗОВ
И АНАЛИЗ СЦЕН

Редакторы А. Бряндинская, И. Маховая
Художник Инфантэ
Художественный редактор В. Шаповалов
Технический редактор Н. Борисова
Корректор И. Алексеева

Сдано в набор 29/X 1975 г. Подписано к печати 25/III 1976 г.
Бум. № 1.60×90¹/₁₆=16 бум. л. Печ. л. 32,00. Уч.-изд. л.
Изд. № 1/8454. Цена 2 р. 59 к. Заказ № 3504

Издательство «Мир»
Москва, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени
Первая Образцовая типография имени А. А. Жданова
Союзполиграфпрома при Государственном комитете
Совета Министров СССР по делам издательств,
полиграфии и книжной торговли.
Москва, М-54, Валовая, 28